Formelsammlung Quantenmechanik

Plancksches Wirkungsquantum: $\hbar = \dfrac{h}{2\pi} \approx 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$

Materiewellen: $E = \hbar\omega, \quad \boldsymbol{p} = \hbar \cdot \boldsymbol{k}, \quad \lambda = \dfrac{h}{|\boldsymbol{p}|} = \dfrac{2\pi}{k}$

Klassische Teilchenbahn $\boldsymbol{r}(t) \Rightarrow$ zeitabhängiger Zustand beschrieben durch eine Wellenfunktion $\Psi(\boldsymbol{r},t) : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \mapsto \mathbb{C}$

Wahrscheinlichkeitsdichte: $|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$

Wahrschein. Teilchen in d^3r zu finden: $\mathrm{d}P(\boldsymbol{r},t) = C \cdot |\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\ \mathrm{d}^3r$

Schrödinger Gleichung:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\cdot\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Ebene Wellen (freies Teilchen): $\Psi(\boldsymbol{r},t) = A \cdot \exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)]$

$\Rightarrow$ Dispersionsrelation: $\omega = \dfrac{\hbar}{2m} \cdot k^2$

Allgemeines Wellenpaket: $\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}^3}\displaystyle\int_{\mathbb{R}^3} g(\boldsymbol{k}) \cdot \exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)]\ \mathrm{d}^3k$

Phasen- und Gruppengeschwind.: $V_\varphi = \dfrac{\omega}{k} = \dfrac{\hbar k}{2m}, \quad V_G = \dfrac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$

Konservatives System: Potential nicht explizit zeitunabhängig
$\Rightarrow$ Separationsansatz $\Psi(\boldsymbol{r},t) = \varphi(\boldsymbol{r})\chi(t)$ der SGL führt zu stationären Zuständen der Form $H\varphi(\boldsymbol{r}) = E\varphi(\boldsymbol{r})$

Mathematischer Rahmen

Delta Distribution: $\delta(x - x_0) = \dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\ \exp(ik(x - x_0))$

Gaußintegral: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \exp\big(-ax^2 + bx\big)\ \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\exp\left(\frac{b^2}{4a}\right)$

Kommutatoralgebra: $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

$[\hat{A},\hat{B}] = -[\hat{B},\hat{A}]$ $\qquad [\hat{A},\hat{B}]^\dagger = [\hat{B}^\dagger,\hat{A}^\dagger]$

$[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$ $\qquad [\hat{A},\hat{B}+\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{C}]$

Dirac-Schreibweise: Brac-ket Schreibweise: Bra: $\langle\Psi|$, Ket: $|\Psi\rangle$

$\Psi(\boldsymbol{r}) \in \mathcal{F} \Leftrightarrow |\Psi\rangle \in \mathcal{H} \Rightarrow \langle\Psi| \in \mathcal{H}^*$

$\langle\Phi|A|\Psi\rangle^* = \langle\Psi|A^\dagger|\Phi\rangle, \quad |\lambda\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \quad \langle\lambda\Psi| = \lambda^*\langle\Psi|$

$(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger \quad (A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

Darstellungswechsel: alte Basis: $\{|u_i\rangle\}$, neue Basis $\{|t_k\rangle\}$
Basiswechselmatrix $S_{ik} = \langle u_i|t_k\rangle \quad S^\dagger_{ki} = (S_{ik})^*$
Transformation in neue Basis: $|u_i\rangle = \displaystyle\sum_k |t_k\rangle\langle t_k|u_i\rangle = \sum_k S^\dagger_{ki}|t_k\rangle$
Matrixdarstellung Operator: $A_{ij} = \langle u_i|A|u_j\rangle$

Projektionsoperator: $\hat{P}_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$

$\hat{P}_\Psi^2 = \hat{P}_\Psi \qquad \sum_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| = \mathbb{1}$

Sei $\{|\Psi_i\rangle\}$ eine Orthonormalbasis von $\mathcal{H}$ (n-dimensional)

$\Rightarrow$ Operator $A = \displaystyle\sum_{i,j=1}^{n} A_{ij}|\Psi_i\rangle\langle\Psi_j|$

Observable:

Hermitescher Operator: $A^\dagger = A$, alle Eigenwerte $(\lambda,\mu\ldots)$ sind reell und Eigenvektoren $(\lambda \neq \mu)$ stehen senkrecht aufeinander

Ein hermitescher Operator ist eine Observable, falls die Menge der Eigenkets $\{|\Psi_n^i\rangle\}$ von A eine Basis von $\mathcal{H}$ bilden.

Seien die Observablen $A, B, C, \ldots$ paarweise vertauschend. Diese Observablen bilden einen vollständigen Satz kommutierender Observablen (v.S.k.O.) falls die gemeinsame Basis nicht entartet ist.

Kommutierende Observable: $[A,B] = 0$

Satz 1: Sei $|\Psi\rangle$ ein Eigenvektor von A, so ist auch $B|\Psi\rangle$ Eigenvektor von A zum selben Eigenwert.

Satz 1a: Jeder Eigenraum von A ist gegenüber der Wirkung von B invariant.

Satz 2: Seien $|\Psi_1\rangle$ und $|\Psi_2\rangle$ Eigenvektoren von A zu verschiedenen Eigenwerten: $\langle\Psi_1|B|\Psi_2\rangle = 0$

Satz 3: Aus A und B lässt sich eine orthonormierte Basis des Zustandsraumes $\mathcal{F}$ konstruieren.

Orts- und Impulsdarstellung

Ortsbasis: $\xi_{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$, $\quad$ Ortsdarstellung $\boldsymbol{P} = \dfrac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}$

Impulsbasis: $\nu_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{p}) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3}\exp\left(\dfrac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}\right)$

Vollständigkeit: $|\Psi\rangle = \displaystyle\int \mathrm{d}^3r\ |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\Psi\rangle = \int \mathrm{d}^3p\ |\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}|\Psi\rangle$

Darstellungswechsel: $\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3}\exp\left(\dfrac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}\right)$

Kommutatoren: $[R_i,P_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad [R_i,R_j] = [P_i,P_j] = 0$

Operatorfunktionen

Sei $C = [A,B]$ mit A und B vertauschend und $F(B)$ analytisch:

$\Rightarrow [A,F(B)] = [A,B]\cdot F'(B), \quad$ mit $F(B) = \sum_n f_n \cdot B^n$

Glauber Formel: $\exp(A)\exp(B) = \exp(A+B)\exp\big(\tfrac{1}{2}\cdot[A,B]\big)$

Postulate der Quantenmechanik

1. Der Zustand eines physikalischen Systems zum Zeitpunkt t_0 wird durch die Angabe des Kets $|\Psi(t_0)$ im Zustandsraum $\mathcal{H}$ definiert.

2. Jede messbare physikalische Größe $\mathcal{A}$ wird durch eine im Zustandsraum $\mathcal{H}$ definierte Observable A beschrieben.

3. Wird eine physikalische Größe $\mathcal{A}$ gemessen, so ist ist das Resultat ein Eigenwerte der Observablen A.

4. Wird $\mathcal{A}$ eines Systems im Zustand $|\Psi\rangle$ gemessen, so ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Ergebnis den Eigenwert a_n liefert: $\mathcal{P}(a_n) = \dfrac{|\hat{P}_n|\Psi\rangle|^2}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = \dfrac{\rangle\Psi|\hat{P}_n|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$

5. Kollaps der Wellenfunktion: Ergibt die Messung von $\mathcal{A}$ den Wert a_n, so ändert sich der Zustand $|\Psi\rangle$: $|\Psi\rangle \Rightarrow \dfrac{\hat{P}_n|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|\hat{P}_n|\Psi\rangle}}$

6. Die zeitliche Entwicklung des Zustands $|\Psi(t)\rangle$ wird bestimmt durch die Schrödinger-Gleichung: $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle$

Der Hamilton-Operator

Skalares Potential: $H = \dfrac{\boldsymbol{P}^2}{2m} + V(\boldsymbol{R})$

Vektorpotential: $H = \dfrac{1}{2m}(\boldsymbol{P} - q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t))^2 + V(\boldsymbol{R},t)$

Spin im Magnetfeld: $H = -\gamma\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}$

Messung von Observablen

Erwartungswert: $\langle A\rangle_\Psi = \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n) = \frac{\langle\Psi|A|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$
Standardabweichung: $\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$

Kompatible Observable: $[A,B]=0$, A und B hermitesch
$\Rightarrow$ Konstruktion einer gemeinsamen Basis aus Eigenvektoren macht die Reihenfolge der Messung von A und B unerheblich.
$\Rightarrow$ v.S.k.O.: Gleichzeitige Messung möglich

Heisenbergsche Unschärfe Relation

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

Ort, Impuls: $\Delta x\cdot\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ Energie, Zeit: $\Delta E\cdot\Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

Erhaltung der Wahrscheinlichkeit: $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = 0$

Kontinuitätsgleichung: $\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{r},t) + \operatorname{div}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = 0$
mit $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^* - \Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi\right]$ und $\rho(\boldsymbol{r},t) = \Psi\Psi^*$

Ehrenfest Theorem: $H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2m} + V(\boldsymbol{R})$

Allgemein: $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle$

$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\boldsymbol{R}\rangle = \frac{1}{m}\langle\boldsymbol{P}\rangle$ $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\boldsymbol{P}\rangle = -\langle\boldsymbol{\nabla}V(\boldsymbol{R})\rangle$

Konservative Systeme:

Hamilton-Operator nicht explizit zeitabhängig $\Rightarrow$ Erhaltung der Energie (Konstante der Bewegung)

$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t_0)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)\right)|\varphi_{n,\tau}\rangle$
Zeitentwicklungsoperator: $U(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right)$

Konstante der Bewegung: $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$, $[H,A]=0 \Rightarrow \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle = 0$

Tunneleffekt: $E < V_0$ Transmission durch Potentialwall
Transmission: $T = \frac{4E(V_0-E)}{4E(V_0-E) + V_0^2\sinh\left(\sqrt{2m(V_0-E)}\cdot l/\hbar\right)}$

Systeme mit Spin $\frac{1}{2}$

Stern-Gerlach Experiment (1922)

Grundzustand von Silber $W = -\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{M} = \gamma\boldsymbol{S}$

Drehmoment: $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t} = \gamma\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{B}$
Ergebnis: Werte für $\boldsymbol{S}_z = \pm\frac{\hbar}{2}$

Spinraum $\dim\mathcal{H} = 2$, $\boldsymbol{S} = (S_x, S_y, S_z)$

Definition: $S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle$, $S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle$

$S_x: |\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle)$ $S_y: |\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm i|-\rangle)$

Zustand präparieren: $|\Psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ mit $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

Pauli-Matrizen Spin-Operator: $S_j = \frac{\hbar}{2}\sigma_j$
$\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$ $\sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$ $\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$
Eigenschaften: $\sigma_j = \sigma_j^\dagger$, $\mathrm{Sp}(\sigma_j) = 0$ $\sigma_j\cdot\sigma_k = i\sum_l \varepsilon_{jkl}\sigma_l + \delta_{ij}\mathbb{1}$

Der harmonische Oszillator

Potential: $V(x) = \frac{1}{2}k\cdot x^2$, Energiezustände: $E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$
Hamilton Operator: $H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$

Leiteroperatoren: $a, a^\dagger, N$ $\hat{X} := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X$, $\hat{P} := \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}P$
Definiere: $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})$, $a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$, $N = a^\dagger a$
$\Leftrightarrow \hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$, $\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$, $\hat{H} = N + \frac{1}{2}$

Lemma 1: Die Eigenwerte ν von N sind positiv oder null.

Eigenwertproblem: $N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu|\varphi_\nu^i\rangle$, $|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0$
$\nu = 0 \Rightarrow a|\varphi_\nu^i\rangle = 0$ und $\nu > 0 \Rightarrow a|\varphi_\nu^i\rangle > 0$ und $a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0$

Lemma 2: $N(a|\varphi_\nu^i\rangle) = (\nu-1)(a|\varphi_\nu^i\rangle)$ Vernichter a

Lemma 3: $N(a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle) = (\nu+1)(a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle)$ Erzeuger $a^\dagger$

$a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$, $a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$, $[a, a^\dagger] = \mathbb{1}$

Hermite Polynome $H_n(z) = \left(2z - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)H_{n-1}(z)$
$H_n(z) = (-1)^n\left(\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}z^n}\exp\left(-z^2\right)\right)\exp\left(z^2\right)$

Drehimpuls $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P}$

Allgemeiner Drehimpuls: $\boldsymbol{J}$ (analog $\boldsymbol{S}, \boldsymbol{L}, \boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$)
$[J_i, J_j] = i\hbar\sum_{k=1}^{3}\varepsilon_{ijk}J_k$, $[\boldsymbol{J}^2, J_i] = 0\ \forall i = 1,2,3$
Leiteroperatoren: $J_\pm = J_x \pm J_y$ mit $J_\pm^\dagger = J_\mp$ und $[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$

Eigenschaften: $\boldsymbol{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2$, $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$

Eigenwerte von $\boldsymbol{J}^2: \hbar^2 j(j+1)$ $j \geq 0$ (j azimuthale Quantenzahl)

Eigenwerte von $J_z: \hbar\cdot m$ (m magnetische Quantenzahl)

Lemma 1: Auswahlregel: $-j \leq m \leq +j$ mit $j = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \ldots$

Lemma 2: $m = \pm j \Rightarrow J_\pm|k,j,m\rangle = 0$

Lemma 3: $m \lesseqgtr \pm j \Rightarrow J_\pm|k,j,m\rangle \neq 0$

Basiszustände: $|k,j,(m\pm1)\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm1)}}|k,j,m\rangle$

Kugelflächenfunktionen: Eigenfunktionen von $\boldsymbol{L}^2$ und L_z

$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-1)^m\frac{2l+1(l-m)!}{4\pi(l+m)!}P_l^m(\cos(\theta))\exp(im\varphi)$

$P_l^m(u) = \sqrt{(1-u^2)^m}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}u^m}P_l(u)$ und $P_l(u) = \frac{(-1)^l}{2^l l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}u^l}(1-u^2)^l$

Das Wasserstoffatom

Stationäre Zustände im Zentralpotential

Hamilton-Funktion: $\mathcal{H} = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathcal{L}^2}{2mr^2} + V(r)$

Hamilton-Operator: $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\boldsymbol{L}^2}{2mr^2} + V(r)$

Radialgleichung von $H\Psi(\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{r})$ mit $\Psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{r}u_{kl}(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$

$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} - \frac{e^2}{r}\right]u_{kl}(r) = E_{kl}\cdot u_{kl}(r)$ $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$

Feinstrukturkonstante: $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$, Definiere: $\lambda_{kl} = \sqrt{-\frac{E_{kl}}{E_1}}$

Bohrradius: $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{\lambda_c}{\alpha} \approx 0{,}52\,\text{Å}$, Definiere: $\rho = \frac{r}{a_0}$

Ionisierungsenergie: $E_1 = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2} = \frac{1}{2}\alpha^2 \mu c^2 \approx 13{,}6\,\text{eV}$

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} - 2\lambda_{kl}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + \left(\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right] u_{kl}(\rho)\exp(-\rho\lambda_{kl}) = 0$$

Energiequantisierung: $\lambda_{kl} = \frac{1}{k+l}$, $E_{kl} = \frac{-E_1}{(k+l)^2}$

Hauptquantenzahl: $n = k + l$, Balmer-Formel für H: $E_n = -\frac{E_1}{n^2}$