

Formelsammlung

Theoretische Physik II: Quantenmechanik

<Marco.Moeller@macrolab.de>

Stand: 21.07.2006 - Version: 1.0.0

ERHÄLTlich UNTER [HTTP://PRIVAT.MACROLAB.DE](http://privat.macrolab.de)

Diese Formelsammlung basiert auf der Vorlesung “Theoretische Physik II: Quantenmechanik” von Prof. Karlheinz Langanke an der Technischen Universität Darmstadt im Sommersemester 2006.

Die folgende Formelsammlung steht zum kostenlosen Download zur Verfügung. Das Urheberrecht und sonstige Rechte an dem Text verbleiben beim Verfasser, der keine Gewähr für die Richtigkeit und Vollständigkeit der Inhalte übernehmen kann.

Inhaltsverzeichnis

<p>1 Wellenfunktion 2</p> <p>1.1 Schrödinger Gleichung 2</p> <p>1.2 statistische Interpretation 2</p> <p>1.3 Wahrscheinlichkeit 2</p> <p> 1.3.1 Diskrete Verteilung 2</p> <p> 1.3.2 Wahrscheinlichkeitsdichten . . . 2</p> <p>1.4 Normierung 2</p> <p>1.5 Impuls 2</p> <p>2 Zeitunabhängige Schrödinger Gl. 3</p> <p>2.1 Stationäre Zustände 3</p> <p> 2.1.1 Statistische Interpretation 3</p> <p> 2.1.2 Zustand definierter Energie (E) . 3</p> <p> 2.1.3 Allgemeine Lösung 3</p> <p> 2.1.4 Stetigkeit 3</p> <p> 2.1.5 Besondere Eigenschaften 3</p> <p>2.2 Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden 4</p> <p>2.3 Harmonische Oszillatoren 4</p> <p> 2.3.1 Potential 4</p> <p> 2.3.2 Algebraische Lösung 4</p> <p> 2.3.3 Analytische Lösung 5</p> <p>2.4 Das “freie” Teilchen 5</p> <p>2.5 Delta 5</p>	<p>2.5.1 Gebundene Zustände 5</p> <p>2.5.2 freier Zustand 5</p> <p>2.6 Endlicher Potentialtopf 6</p> <p> 2.6.1 Gebundener Zustand 6</p> <p> 2.6.2 Streulösung 6</p> <p>3 Formalisierung der Quantenmechanik 6</p> <p>3.1 Funktionenräume 6</p> <p> 3.1.1 Hilbertraum 7</p> <p> 3.1.2 Verallgemeinerte statistische Interpretation 7</p> <p> 3.1.3 Vorgehen 7</p> <p> 3.1.4 Projektor / Basiswechsel 7</p> <p> 3.1.5 diskretes Spektrum 7</p> <p> 3.1.6 kontinuierliches Spektrum 7</p> <p> 3.1.7 Heisenberg’s Unschärfe 8</p> <p> 3.1.8 Energie-Zeit Unschärfe 8</p> <p> 3.1.9 Zeitverhalten von Observablen . . 8</p> <p>4 QM in 3 Dimensionen 8</p> <p>4.1 Verallgemeinerungen 8</p> <p> 4.1.1 Harmonische Oszillator in 3d . . . 8</p> <p>4.2 Drehimpuls 9</p> <p> 4.2.1 Bahndrehimpuls 9</p> <p> 4.2.2 Spin 9</p> <p> 4.2.3 Spin beim Elektron 9</p> <p>4.3 Radiale Schrödingergleichung 10</p> <p> 4.3.1 ∞ kugelsymmetrisches Potential 10</p> <p>4.4 Wasserstoff Atom 10</p> <p>5 Identische Teilchen 11</p> <p>5.1 System unabhängiger Teilchen 11</p> <p>6 Zeitunabhängige Störungstheorie 11</p> <p>6.1 Nicht-entarteter Fall 11</p> <p>6.2 Entartete Störungstheorie 12</p>
--	--

7 Variationsverfahren 12
 7.1 Obere Schranke 12
 7.2 Spin / Drehimpuls Kopplung 12
 8 Zeitabhängige Störungstheorie 13

1.3.2 Wahrscheinlichkeitsdichten

x kontinuierlich

Wahrscheinlichkeitsdichte $\varrho(x)$

- Wahrscheinlichkeit, daß ein Ereigniss zufällig zwischen x und $x + dx$ liegt ist $\varrho(x) \cdot dx$.
- Wahrscheinlichkeit für ein Ereigniss im Intervall $[a, b]$

$$P_{ab} = \int_a^b \varrho(x) dx$$

Wahrscheinlichkeitsverteilung $\int_{-\infty}^{\infty} \varrho(x) dx = 1$

Mittelwert $\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \cdot \varrho(x) dx$

- $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot \varrho(x) dx$

Varianz $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

1 Wellenfunktion

1.1 Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V \cdot \psi(x,t)$$

- $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,0545727 \cdot 10^{-34} Js = 6582122 \cdot 10^{-22} MeVs$
- de Broglie $p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$
- Ist linear in ψ . D.h. wenn ψ_1, ψ_2 Lsg., dann auch $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ für feste c_1, c_2 .

1.2 statistische Interpretation

$$|\psi(x,t)|^2 dx = \begin{cases} \text{Wahrscheinlichkeit ein Teilchen} \\ \text{im Intervall } [x, x + dx] \text{ zu finden} \end{cases}$$

- Durch Messung *Kollabiert* die Wellenfunktion zu einem Peak am gemessenen Wert

1.3 Wahrscheinlichkeit

1.3.1 Diskrete Verteilung

von Ereignissen $N(j)$ mit $0 \leq j \leq \infty$ und $N(j) \geq 0$ für alle j .

totale Anzahl von Ereignissen $N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j)$

Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(j) = \frac{N(j)}{N}$

- $\sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1$

Wahrscheinlichstes Ereigniss $\max\{P(j)\}$

mittleres Ereigniss $\sum_{j=0}^{N_{med}} P(j) = \sum_{j=N_{med}}^{\infty} P(j)$

Mittelwert / Erwartungswert $\langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j) \cdot P(j)$

- $\langle j \rangle = \bar{j} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{\infty} j \cdot N(j) = \sum_{j=0}^{\infty} j \cdot P(j)$

Varianz $\sigma^2 = \langle (j - \langle j \rangle)^2 \rangle$

- $\Delta j = j - \langle j \rangle$
- $\sigma^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2$
- $\sigma^2 \geq 0 \Rightarrow \langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2$
- σ = Standardabweichung

1.4 Normierung

Normierungsbedingung Falls sich ψ statistisch interpretieren lassen soll, muss gelten

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$

Falls ψ Lösung der Schwingungsgleichung, dann ist auch $A\psi$ Lösung (A = Konstante).

- Falls ψ Lösung, aber $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx$ ist *nicht* endlich, dann beschreibt ψ keinen quantenmechanischen Zustand.

- Falls $\psi = 0 \Rightarrow$ auch nicht normierbar / keine Beschreibung eines qm Teilchens

- Multiplikation von ψ mit $A = e^{i\alpha}$ mit $\alpha \in \mathbb{R}$ ändert nichts an der Wahrscheinlichkeitsverteilung

- $\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 0$

- $\frac{\partial}{\partial t} |\psi(x,t)|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial t} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right)$

1.5 Impuls

$$\langle v \rangle_t \equiv \frac{d}{dt} \langle x \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{\hbar}{im} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx$$

$$\langle x \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi dx$$

Impuls $p \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

- Messgröße klassisch $A(p, x) \Rightarrow$ Messgröße q.m. $A\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, x\right)$

- es kommt entscheidend darauf an, an welcher Stelle der Operator in Ausdrücken steht
- $m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle$

Kinetische Energie $T = \frac{p_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$

Heisenbergsche Unschärferelation $\sigma_x \cdot \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}$

2 Zeitunabhängige Schrödinger Gl.

2.1 Stationäre Zustände

- Potential $V(x)$ ist Zeitunabhängig
- Schrödinger Gleichung lässt sich schreiben als

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \psi(x, t)$$

- Separationsansatz

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot f(t)$$

- Löse für $E \in \mathbb{R}_{>0}$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} f(t) &= E f(t) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right) \varphi_E(x) &= E \varphi_E(x) \end{aligned}$$

die zweite Gleichung heißt *Zeitunabhängige Schrödingergleichung*

- Lösung

$$\psi(x, t) = \phi_E(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

- Falls sich das System in einem stationären Zustand mit der Energie E befindet:
 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = E \psi(x, t)$

2.1.1 Statistische Interpretation

- ψ Normierbar $\Leftrightarrow \varphi_E$ Normierbar
- Jeder Erwartungswert einer dynamischen Variable (Operator) $A(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx})$ hängt nicht von t ab. (*in einem Eigenzustand*)

$$\rightarrow \langle x \rangle = \text{const}, \frac{d}{dt} \langle x \rangle = 0 = \frac{1}{m} \langle p \rangle$$

2.1.2 Zustand definierter Energie (E)

- Analog zur klassischen Hamilton Funktion q.m. Hamilton Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

- Zeitunabhängige Schrödinger Gleichung lässt sich schreiben als

$$\hat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

was einer Eigenwertgleichung entspricht

- $\langle H \rangle = E$
 $\langle H^2 \rangle = E^2$
 $\sigma = 0$

Grundzustand x_0 ist der Zustand in dem $\varphi(x)$ keine Nullstellen (außer evtl. am Rand) besitzt

- dies ist auch der Zustand mit der geringsten Energie

Angeregte Zustände haben $n = 1, 2, \dots$ Knoten

gebundener Zustand erhält man, falls gilt $E < \lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x)$

- Dies bedeutet, dass das Teilchen nicht in die Unendlichkeit verschwinden kann, sondern an eine Ortsumgebung gebunden ist

2.1.3 Allgemeine Lösung

Da die Schrödinger Gleichung linear ist, ergibt sich die allgemeine Lösung als Superponierung über alle Eigenlösungen

$$\psi(x, t) = \sum_i c_i \varphi_{E_i}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t}$$

2.1.4 Stetigkeit

- φ_E ist überall stetig
- $\frac{d\varphi_E}{dx}$ ist überall stetig, wo das Potential *nicht* unendlich wird. Es gilt

$$\Delta \left(\frac{d\varphi_E}{dx} \right) = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} V(x) \cdot \varphi_E(x) dx$$

2.1.5 Besondere Eigenschaften

Symmetrie Ist $V(x) = V(-x)$ ist zu gegebenen $\varphi(x)$ auch $\varphi(-x)$ eine Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung zur gleichen Energie.

- Falls es je Energie nur eine Lösung gibt, muss dies Folglich eine gerade oder eine ungerade Funktion sein.

Merkregel für Bereich mit Konstanten Potential V_0 gilt

- bei $E < V_0$ ist $\varphi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}$
 $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

- bei $E > V_0$ ist $\varphi(x) = A \sin(\omega x) + B \cos(\omega x)$
 $\omega = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$

2.2 Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

- ψ muss stetig in x sein!
- Lösung im Intervall $[0, a]$ ist

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$$

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n \frac{\pi}{a} x\right)$$

außerhalb des Intervalls ist $\varphi_n(x) = 0$. mit $n \geq 1$

- Die φ_i bilden ein Orthonormalsystem, und sogar eine Basis

$$\varphi_i^* \varphi_j = \delta_{ij}$$

die *Fourier Basis*

- Falls $f(x) = \sum_i c_i \varphi_i(x)$
- gilt $c_i = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i^*(x) f(x) dx$

- Mittelwert von x ist Genau in der Mitte des Potentials, im Symmetriepunkt $\langle x \rangle = \frac{a}{2}$

- $\psi(x, t) = \sum_i c_i \varphi_i(x) e^{-\frac{\hbar}{i} E_i t}$

- $\sum_i |c_i|^2 = 1$
falls die φ_i eine Orthonormalbasis bilden

- $\langle H \rangle = \sum_i |c_i|^2 E_i$
d.h. die $|c_i|^2$ sind die Wahrscheinlichkeiten als Energie E_i zu messen

2.3 Harmonische Oszillatoren

- In der Umgebung eines lokalen Extremums lässt sich jede Funktion näherungsweise als Parabel auffassen.

- Harmonische Oszillatoren in klassischer Mechanik

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

2.3.1 Potential

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

- hat Lösung

$$\Psi(x, t) = \varphi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

- Lösungsansatz

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] \varphi(x) = E\varphi(x)$$

2.3.2 Algebraische Lösung

- Definiere

$$a_+ := \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right)$$

$$a_- := \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right)$$

- Operatoridentitäten

$$a_- a_+ = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2} \hbar\omega$$

$$a_+ a_- = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - \frac{1}{2} \hbar\omega$$

- Hamilton Operator

$$\hat{H} = a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar\omega$$

- Impuls

$$p = \sqrt{\frac{m}{2}} (a_+ + a_-)$$

- Ort

$$x = i\sqrt{\frac{1}{2m\omega^2}} (a_- - a_+)$$

Kommutator $[A, B] = AB - BA$

- $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$
- $[x, p] = i\hbar$
- $[a_-, a_+] = \hbar\omega$

Lösungen falls φ Lösung der Schrödinger Gleichung für Energie E , dann ist $(a_+ \varphi)$ Lösung für die Energie $E + \hbar\omega$ und $(a_- \varphi)$ Lösung für die Energie $E - \hbar\omega$.

Normierung falls $\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi|^2 dx = 1$ gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} |a_- \varphi|^2 dx = E - \frac{1}{2} \hbar\omega$$

Lösungen

$$\varphi_n(x) = A_n (a_+)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

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

Iterative Lösung

$$a_- \varphi_n = -i\sqrt{n\hbar\omega} \varphi_{n-1}$$

$$a_+ \varphi_n = i\sqrt{(n+1)\hbar\omega} \varphi_{n+1}$$

- die Phase von $\pm i$ ist eigentlich irrelevant, ist aber so in der Konvention
- $a_+ a_- \varphi_n = n\hbar\omega \varphi_n$
 $a_- a_+ \varphi_n = (n+1)\hbar\omega \varphi_n$
- $\langle n|x|m \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{m}\delta_{n,m-1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1})$

Virialsatz besagt (nur beim harmonischen Oszillator)

$$\frac{1}{2} \langle E \rangle = \langle T \rangle = \langle V \rangle$$

2.3.3 Analytische Lösung

Lösung

$$\begin{aligned}\varphi_n(\xi) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \\ \xi(x) &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \\ E_n &= \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega\end{aligned}$$

Hermite Polynome

$$\begin{aligned}H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\ H_n(x) &= \sum_{j=0}^n a_j x^j \\ &= (-1)^n e^{\frac{x^2}{2}} \frac{d^n}{dx^n} e^{-\frac{x^2}{2}} \\ &= xH_{n-1}(x) - nH_{n-2}(x)\end{aligned}$$

- $a_{j+2} = \frac{2j+2n}{(j+1)(j+2)} a_j$
- $a_n = 2^n$
- Es kommen je nachdem ob n gerade oder ungerade ist nur gerade oder ungerade Potenzen in $H_n(x)$ vor.

- Bilden ein Orthogonalsystem

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n^*(x) H_m(x) e^{-\frac{x^2}{2}} dx = n! \sqrt{2\pi} \delta_{nm}$$

- Lösen die DGL mit $n \in \mathbb{N}$

$$y'' - 2xy' + 2ny = 0$$

2.4 Das "freie" Teilchen

Potential $V(x) = 0$

Lösung mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}$$

- Bestimmung von $\phi(k)$ durch Fouriertransformation der Anfangsbedingung

$$\begin{aligned}\Psi(x, 0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi(k) e^{ikx} \\ \phi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, 0) e^{-ikx}\end{aligned}$$

- Voraussetzung ist, das die folgenden Integrale existieren

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, 0)|^2 &< \infty \\ \int_{-\infty}^{\infty} dk |\phi(x, 0)|^2 &< \infty\end{aligned}$$

Geschwindigkeit der Welle ist

$$\text{Phasengeschwindigkeit } v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

$$\text{Gruppengeschwindigkeit } v_g = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k=K_0} = \frac{\hbar k}{m}$$

2.5 Delta

Dirac Delta $\delta(x)$ Definition siehe mein Skript für die theoretische Physik 1

Potential $V(x) = -\alpha\delta(x)$

- Entspricht Einem unendlich hohen Spike im Potential am Punkt $x = 0$

2.5.1 Gebundene Zustände

Bedingung $E < 0, \alpha > 0$

Lösung

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-\frac{m\alpha}{\hbar^2}|x|} \\ E &= -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}\end{aligned}$$

2.5.2 freier Zustand

Beschreibung Es wird angenommen, das hier Teilchen von $-\infty$ in die Anordnung kommen und durch das Potential gestreut werden.

- Die Lösung in der Vorlesung hat einiges an Beweisen ausgespart, und ist nur Oberflächlich korrekt. Es würde aber ein Korrekter Beweis das gleiche liefern

Reflexionskoeffizient $R = \frac{\beta^2}{1-\beta^2} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}}$

- $\beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}$
- $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$
- Wahrscheinlichkeit, das ein Teilchen reflektiert wird
- man hat Reflexion, obwohl der Spike weit unter dem Potential liegt

Transmissionskoeffizient $T = \frac{1}{1+\beta^2} = \frac{1}{1 + \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}}$

- Wahrscheinlichkeit, das ein Teilchen passieren kann
- $R + T = 1$
- Unabhängig vom Vorzeichen von α bzw. der Richtung des Potential-Spikes (\pm). Das heißt, das ein Teilchen durch eine Barriere Durchtunneln kann

2.6 Endlicher Potentialtopf

$$\text{Potential } V(x) = \begin{cases} -V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

- $V_0 > 0$

2.6.1 Gebundener Zustand

- $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$
- $l = \frac{\sqrt{2m(V_0+E)}}{\hbar} \in \mathbb{R}$

gerade Lösungen

$$\varphi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x} & x > a \\ D \cos(lx) & 0 \leq x \leq a \\ \varphi(-a) & \text{sonst} \end{cases}$$

- $Fe^{-\kappa a} = D \cos(la)$
- $\kappa = l \tan(la)$
- $(\kappa a)^2 + (la)^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2$
- Es gibt immer mindestens eine gerade Lösung!
- Anzahl der Lösungen ist größtes n das die Gleichung $(n-1)\pi \leq \sqrt{mV_0} \frac{a}{\hbar}$ erfüllt
- Im Grenzfall $mV_0 a^2 \rightarrow \infty$ ergibt sich $la = \frac{\pi}{2}, \frac{3}{2}\pi, \dots, (n + \frac{1}{2})\pi, \dots$

ungerade Lösungen

$$\varphi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x} & x > a \\ D \sin(lx) & 0 \leq x \leq a \\ -\varphi(-a) & \text{sonst} \end{cases}$$

- $Fe^{-\kappa a} = D \sin(la)$
- $\kappa = -l \cot(la)$
- $(\kappa a)^2 + (la)^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a^2$
- Anzahl der Lösungen ist größtes n das die Gleichung $(n + \frac{1}{2})\pi \leq \sqrt{mV_0} \frac{a}{\hbar}$ erfüllt
- Im Grenzfall $mV_0 a^2 \rightarrow \infty$ ergibt sich $la = \pi, 2\pi, \dots, n\pi, \dots$

Insgesamt haben wir im Grenzfall den Unendlichen Potentialtopf um V_0 nach unten verschoben.

2.6.2 Streulösung

Transmissionskoeffizient T mit

$$T^{-1} = 1 + \sin^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)} \right) \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)}$$

- Bei bestimmten Energien

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E+V_0)} = n\pi$$

erhält man vollständige Transmission

Reflexionskoeffizient $R = 1 - T$

3 Formalisierung der Quantenmechanik

3.1 Funktionenräume

Vektoren $|\alpha\rangle$ entspricht einer Funktionen $\alpha(x)$. Diese Funktionen bilden einen \mathbb{C} Vektorraum.

Lineare Abbildungen Sind lineare Operatoren \hat{X} . Diese sind im endlichdimensionalen mit Matrizen vergleichbar

- Bsp: $\frac{\hat{d}}{dx}$ in Polynomen vom Grad N , \hat{x} im formaten Potenzreihen

Eigenfunktion $\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$ α heißt Eigenfunktion zum Eigenwert λ von \hat{T}

Skalarprodukt $\langle \alpha | \beta \rangle = \int \alpha^*(x) \beta(x) dx$

- Die Grenzen müssen Passend zu Problem definiert werden
- Funktionen müssen Quadratintegrable sein $\Leftrightarrow \langle \alpha | \beta \rangle < \infty$

hermitesche Operatoren $\langle \alpha | \hat{T} \beta \rangle = \langle \hat{T} \alpha | \beta \rangle$ für alle $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$

- $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ ist hermitesch, falls
 - $\alpha(a) = \alpha(b)$ für alle $|\alpha\rangle$ (a, b sind Integrationsgrenzen)
 - oder bei quadrat-integrable Funktionen in $[-\infty, \infty]$

Eigenschaften einer hermiteschen Operation $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$

- Alle Eigenwerte sind reel
- Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten sind orthogonal

- Für endlich dimensionale Vektorräume spannen die Eigenvektoren den ganzen Raum auf
- $\langle \hat{T} \rangle = \sum_i |c_i|^2 \lambda_i$ Erwartungswert der Messung
- Eigenwerte von \hat{T} = Mögliche Messwerte jeweils mit Wahrscheinlichkeit $|\langle \text{Eigenvektor}_i | \psi \rangle|^2$

3.1.1 Hilbertraum

In der QM sind wir an Fkt. interessiert, die quadrat-integralabel sind

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x) \Psi(x) dx < \infty$$

Der Raum der von solchen Funktionen aufgespannt wird, wird mit

$$L_2(-\infty, \infty)$$

bezeichnet.

Ein Vektorraum H mit einem inneren Product, $\langle \cdot | \cdot \rangle$ heißt Hilbertraum, falls alle Konvergenten Reihen in H gegen einen Vektor in H konvergieren (Vollständig).

3.1.2 Verallgemeinerte statistische Interpretation

1. Ein Teilchen wird repräsentiert durch eine Wellenfunktion $\Psi(x, t)$
2. $|\Psi(x, t)|^2 dx$ ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall $[x, x + dx]$ zur Zeit t zu finden
3. Die Normierung muss erfüllt sein: $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx$

Dann haben wir $\Psi(x, t) \in L_2(-\infty, \infty)$ mit dem inneren Produkt $\langle \alpha | \beta \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \alpha^* \beta dx$

1. Wir identifizieren ein Teilchen mit einem Vektor in L_2 und bezeichnen es als $|\Psi\rangle$. Die Normierung fordert $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$
2. Meßgrößen sind hermitesche Operatoren \hat{Q} . Der Erwartungswert von \hat{Q} ist

$$\langle \hat{Q} \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle$$

3. Messungen von Observablen liefern die Eigenwerte (reellen) von \hat{Q} und zwingen das System einen Eigenzustand anzunehmen

4. Die Varianz der Messung ist $\sigma_{\hat{Q}}^2 = \langle (\hat{Q} - \langle \hat{Q} \rangle)^2 \rangle = 0$ genau dann, wenn sich das System in einem Eigenzustand von \hat{Q} befindet.

3.1.3 Vorgehen

1. $\hat{Q} |\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle$ bestimmen des Eigenspektrum (Menge der Eigenwerte) mit den zugehörigen Eigenvektoren
2. Bilden einer Orthonormalbasis aus den $|\psi_\lambda\rangle$
3. Ein beliebiger Zustand ist aus Basis linear kombinierbar $|\psi\rangle = \sum_\lambda a_\lambda |\psi_\lambda\rangle$, $|a_\lambda|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit λ bei einer Messung von \hat{Q} in $|\psi\rangle$ zu finden.

3.1.4 Projektor / Basiswechsel

Einsoperator $1 = \sum_n |e_n\rangle \langle e_n|$

- Falls $\{|e_n\rangle\}$ eine Vollständige, orthonormierte Basis bilden

Projektor ist ein Operator, für den gilt $P|\beta\rangle = P^2|\beta\rangle$

- Eigenwerte 0, 1

Zerlegung $\hat{Q} = \sum_n \lambda_n |e_n\rangle \langle e_n|$

- Jeder hermitesche Operator lässt sich auf "Diagonalgestalt" bringen

3.1.5 diskretes Spektrum

Vollständigkeit $|\psi\rangle = \sum_n c_n |e_n\rangle$

$$\langle e_k | \psi \rangle = c_k$$

Wahrscheinlichkeit dass λ_n Auftritt

$$|c_n|^2 = |\langle e_n | \psi \rangle|^2$$

3.1.6 kontinuierliches Spektrum

Eigenzustände $e_{x'} = \delta(x - x')$

$$|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk c_k |e_k\rangle$$

Eigenwertgleichung $\hat{Q} |e_n\rangle = \lambda_n |e_n\rangle$ mit n kontinuierlich und $-\infty \leq \lambda_n \leq \infty$

Othogonale Basis $\langle e_n | e_k \rangle = \delta(n - k)$

- $\langle x | \psi \rangle = \psi(x) = \langle \psi | x \rangle^*$
- $\langle p | \psi \rangle = \psi(p) = \langle \psi | p \rangle^*$

Vollständigkeit $1 = \int_{-\infty}^{\infty} dk |e_k\rangle \langle e_k|$

Wahrscheinlichkeitsdichte $|c_k|^2 dk = |\langle e_k | \psi \rangle|^2 dk$

Fourier Transformation

$$\begin{aligned}\Psi_p(x) &\equiv \langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{i}{\hbar}px} \\ \Psi_x(p) &\equiv \langle p|x\rangle \\ &= \langle x|p\rangle^* \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{i}{\hbar}px}\end{aligned}$$

damit gilt

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \Psi_p(x) \Psi(p) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar}px} \Psi(p) \\ \Psi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}px} \Psi(x)\end{aligned}$$

Mittelwerte von Kontinuierlichen Spektren

$$\langle Q(x, p, t) \rangle = \begin{cases} \int \Psi^* \hat{Q}(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}, t) \Psi dx & \text{im Ortsraum} \\ \int \Psi^* \hat{Q}(-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dp}, p, t) \Psi dp & \text{im Impulsraum} \end{cases}$$

3.1.7 Heisenberg's Unschärfe

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2$$

- Mit $\hat{A} = \hat{x}$ und $\hat{B} = \hat{p}$ folgt die Heisenbergsche Unschärfe
- Falls die beiden Observablen \hat{A} und \hat{B} vertauschen ($[\hat{A}, \hat{B}] = 0$) und Hermitesch sind, gibt es eine Basis in der \hat{A} und \hat{B} gleichzeitig diagonal werden (scharf gemessen werden können).
- Wenn $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ dann existiert keine Basis in der \hat{A} und \hat{B} gleichzeitig diagonal werden
- Bei einer Transformation S die H invariant läßt

$$S^{-1}HS = H$$

(entspr. $[H, S] = 0$). Ist $|n\rangle$ ist Eigenzustand von H mit Eigenwert E_n , dann ist auch $S|n\rangle$ Eigenzustand von H mit gleichen Eigenwert E_n .

→ entweder $|n\rangle$ und $S|n\rangle$ sind die gleichen Zustände oder das Spektrum von H ist entartet.

3.1.8 Energie-Zeit Unschärfe

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

- nicht vom gleichen Typ wie x, p Unschärfe, weil t keine Observable ist.

3.1.9 Zeitverhalten von Observablen

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{Q} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle$$

4 QM in 3 Dimensionen

4.1 Verallgemeinerungen

Kinetische Energie $T = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$

- klassisch → qm: $q_i \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx_i}$

Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r})}{\partial t} = H\Psi(\vec{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r})$$

Statistische Interpretation

$$\int |\Psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1$$

Für zeitunabhängige Potentiale vereinfacht sich dies zu

$$\Psi(\vec{r}) = \varphi_n(\vec{r}) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \varphi_n(\vec{r}) = E_n \varphi_n(\vec{r})$$

$$\int |\varphi_n(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1$$

Kommutatoren zwischen Ort und Impuls

- $[r_i, p_i] = i\hbar \delta_{ij}$
- $[r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0$

Ehrenfest Theorem

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle \vec{r} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \vec{p} \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle &= \langle -\vec{\nabla} V \rangle\end{aligned}$$

4.1.1 Harmonische Oszillator in 3d

$$\varphi_n(\vec{r}) = \varphi_{nx}(x) \cdot \varphi_{ny}(y) \cdot \varphi_{nz}(z)$$

Entartete Zustände liegen vor, wenn es zu einem Eigenwert mehrere Eigenzustände existieren.

4.2 Drehimpuls

Transformation $\frac{\vec{p}^2}{2m} \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} \right)$

- in Kugelkoordinaten

Kommutator $[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k$

- mit $i, j, k \in \{x, y, z\}$

- $[L_i, r_j] = \varepsilon_{ijk} i\hbar r_k$
 $[L_i, p_j] = \varepsilon_{ijk} i\hbar p_k$

- $[\hat{H}, L_i] = 0$
 falls V nur von r abhängt

- Bilden eine $SU(2)$ Algebra (Li Algebra)

Betrag $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$

- $[L^2, L_i] = 0$
- Dies ist der einzige Operator der mit L_i vertauscht
- gleichzeitig Diagonalisierbar sind also L^2 und eine Komponente von L

→ Konvention: dies sind L^2, L_z

±Operatoren

$$L_+ = L_x + iL_y$$

$$L_- = L_x - iL_y$$

- $(L_+)^{\dagger} = L_-$
 $(L_-)^{\dagger} = L_+$
- L_+, L_- sind *nicht* hermitesch
- $[L^2, L_{\pm}] = 0$
- $[L_z, L_+] = \hbar L_+$
 $[L_z, L_-] = -\hbar L_-$
- $L^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar |l, m\rangle$
 $L_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle$
- $L_+ |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\hbar |l, m+1\rangle$
 $L_- |l, m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\hbar |l, m-1\rangle$
- $L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$
 $L_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-)$

Eigenwerte Falls f Eigenfunktion von L^2 mit Eigenwert $\lambda = l(l+1)\hbar$ und zu L_z mit Eigenwert $\mu = m\hbar$

- dann ist auch $L_{\pm} f$ Eigenfunktion von L^2 und L_z zu Eigenwerten $\lambda, \mu \pm \hbar$.
- $\lambda \geq \mu^2$

- für festes λ gibt es Maximum und Minimum für μ

$$\lambda = \mu_{max}^2 + \hbar \mu_{max}$$

$$= \mu_{min}^2 - \hbar \mu_{min}$$

- $-l \leq m \leq l$ in ganzzahligen Schritten.
- $2 \cdot l \in \mathbb{N}$ (also l halbzahlig)
- zu jedem l gibt es $2l + 1$ verschiedene Werte von m

4.2.1 Bahndrehimpuls

$$\vec{L} = \frac{\hbar}{i} (\vec{r} \times \vec{\nabla})$$

- entspricht $\vec{r} \times \vec{p}$
- $L^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar |l, m\rangle$
- m muss ganzzahlig sein $\Rightarrow l$ auch
- $|l, m\rangle = Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$
- $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) \cdot e^{i \cdot m \cdot \varphi}$
- $P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{\partial^{l+m}}{\partial x^{l+m}} P_l(x)$
- $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{\partial^l}{\partial x^l} (x^2 - 1)^l$

4.2.2 Spin

Ist ein innerer Freiheitsgrad von Elementarteilchen. Er entspricht ebenfalls einem Drehimpuls.

- \vec{S} entspricht dem \vec{L} beim Bahndrehimpuls
- s entspricht dem l beim Bahndrehimpuls
- Alle vom Bahndrehimpuls bekannten Beziehungen gelten analog auch für den Spin
- s ist für eine Teilchenart fest
 → $s = \frac{1}{2}$ für: Elektronen, Proton, Neutron, ...
 (*Fermionen*, da s halbzahlig)
 → $s =$ ganzzahlig für *Bosonen*

4.2.3 Spin beim Elektron

Elektron Spin $s = \frac{1}{2}$

Eigenzustände

$$\chi_+ = |sm\rangle_1 = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\chi_- = |sm\rangle_2 = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

- Spin up: χ_+
 Spin down: χ_-

Operatoren in Basis aus Eigenzuständen

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 &= \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_i &= \frac{\hbar}{2}\sigma_i \\ \hat{S}_+ &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{S}_- &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

- Eigenwerte von $\hat{S}_i = \pm \frac{\hbar}{2}$

Pauli Matrizen sind

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

- $\det(\sigma_i) = -1$

- $\text{trace}(\sigma_i) = 0$

- $\lambda_{1/2} = \pm 1$

- Eigenvektoren für σ_x

$$\begin{aligned}\chi_+^{(x)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_+^{(z)} + \chi_-^{(z)} \right) \\ \chi_-^{(x)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_+^{(z)} - \chi_-^{(z)} \right)\end{aligned}$$

- $\sigma_i^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = E$

Zustand

$$\begin{aligned}\chi &= \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+^{(z)} + b\chi_-^{(z)} \\ &= \frac{a+b}{\sqrt{2}}\chi_+^{(x)} + \frac{a-b}{\sqrt{2}}\chi_-^{(x)}\end{aligned}$$

4.3 Radiale Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u_l(r)}{\partial r^2} + \left(V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - E \right) u_l(r) = 0$$

- $u_l(0) = 0$
da $\Psi(\vec{r})$ sonst in 0 singular wird

totale Lösung $\Psi(\vec{r}) = \frac{u_l(r)}{r} Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$

- für festes m, l verschiedene Eigenwerte die mit n durchnummeriert sind

Normierung $\int_0^\infty |u_l(r)|^2 dr = 1 \quad \Rightarrow$
 $\int |\Psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1$

4.3.1 ∞ kugelsymmetrisches Potential

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ \infty & r \geq a \end{cases}$$

- $\beta_{n,l} = ka = n\pi$
- $E_{n,l} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{n,l}^2$
- $u(r) = A \cdot r \cdot j_l(k \cdot r)$
- sphärische Bessel Funktion
 $j_l(x) = (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin(x)}{x}$
- sphärische von Neumann Funktion
 $u_l(x) = -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos(x)}{x}$

4.4 Wasserstoff Atom

Annahmen zur vereinfachten Rechnung

- Masse Proton ∞
- Schwerpunkt im Proton

Potential $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Eigenwertgleichung $\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u(\rho)$

- $E < 0$
- $\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$
- $\rho = \kappa r = \frac{r}{a_n}$
- $\rho_0 = \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}$
- $u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho)$
 $v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \rho^j$
 $a_{j+1} = \frac{2(l+j+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} a_j$
 $a_{j_{max}+1} = 0$
- $n = j_{max} + l + 1$
- $E = -\left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2}$
 $E = \frac{E_1}{n^2}$
 $E_1 = \frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 = -13,59 \text{ eV}$
- $\kappa = \frac{1}{a \cdot n}$
 $a = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m Bohr Radius}$
- $v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$
 $L_{q-p}^p(x) = (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_q(x)$
 $L_q(x) = e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q)$ Laquerre Polynome
- $0 \leq l \leq n-1$
- Die Parität (ob es eine gerade oder ungerade Funktion ist) der Funktionen ist $(-)^l$
- Die Entartung des Zustandes mit Energie $E = \frac{E_1}{n^2}$ ist n^2
- $E_\gamma = h \frac{c}{\lambda} = E_i - E_f = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$
 $R = 1,097 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{m}}$ Rydberg-Konstante

5 Identische Teilchen

In der QM sind identische Teilchen ununterscheidbar

Austauschoperator

$$P\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

- lässt sich auch Erweitern auf eine Wellenfunktion von mehr als 2 Teilchen
- Eigenwerte ± 1
- Eigenfunktionen $\pm\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$
- H und P sind simultan diagonalisierbar

Symmetrische Wellenfunktionen

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

- ident. Teilchen, die gegen Vertauschung symmetrisch sind, heißen *Bosonen*
- dies sind genau die Teilchen mit ganzzahligen Spin
- Wechselwirkungsteilchen: Photonen, W, Z Boson, Gluonen

Antisymmetrische Wellenfunktion

$$\varphi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\varphi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$$

- *Fermionen*
- dies sind genau die Teilchen mit halbzahligen Spin
- Bausteine der Natur: Neutrinos, Elektronen, Protonen, Neutronen, Quarks

5.1 System unabhängiger Teilchen

Potential lässt sich hier schreiben als

$$V(r_1, \dots, r_n) = \sum_{i=1}^n V_i(r_i)$$

Lösung der Schrödingergleichung über Trennung der Variablen

unterscheidbare Teilchen

$$\varphi(r_1, \dots, r_n) = \prod_{i=1}^n \varphi_i(r_i)$$

ununterscheidbare Fermionen

$$\varphi(r_1, \dots, r_n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \det \{ \varphi_i(r_j) \}_{i,j=1, \dots, n}$$

Pauli Prinzip da Determinante für zwei gleiche Zustände mit = 0 reagiert sind solche Zustände nicht mehr normierbar und damit Verboten

- dieses φ ist antisymmetrisch

unterscheidbare Bosonen gleiche Formel wie bei Fermionen, bloß alle Terme der Determinante positiv abgeändert werden.

- dieses φ ist symmetrisch

- Die Grundzustandsenergie eines Bosonen Systems ist immer kleinergleich der eines Fermionensystems

$$E_0^B \leq E_0^F$$

System aus zwei Teilchen. gesucht ist $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ bei einem System mit

$$\varphi(x_1, x_2) = \varphi_a(x_1) \cdot \varphi_b(x_2)$$

unterscheidbare Teilchen

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2 \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

identische Bosonen

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2 \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b + 2 |\langle x \rangle_{ab}|^2$$

- $\langle x \rangle_{ab} = \int dx \varphi_a^*(x) \cdot x \cdot \varphi_b(x)$
- Bosonen rücken durch Wechselwirkungstherm also näher zusammen \rightarrow spielt nur bei sehr nahe Benachbarten Teilchen eine Rolle

identische Fermionen

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2 \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b + 2 |\langle x \rangle_{ab}|^2$$

- Fermionen entfernen sich also durch Wechselwirkungstherm \rightarrow spielt nur bei sehr nahe Benachbarten Teilchen eine Rolle

6 Zeitunabhängige Störungstheorie

6.1 Nicht-entarteter Fall

$$H = H^0 + H'$$

mit

1. $H^0 \varphi_n^0 = E_n^0 \varphi_n^0$ bekannt
2. $\langle \varphi_n^0 | \varphi_m^0 \rangle = \delta_{nm}$
3. $H' \ll H^0$ "kleine" Störung
Energieskala von H' ist klein gegenüber $(E_n^0 - E_m^0)$

Entwickeln mit $\lambda \in [0, 1]$ Entwicklungsparameter

$$H' \rightarrow \lambda H'$$

$$\begin{aligned} (H^0 + \lambda H') \varphi_n &= E_n \varphi_n \\ \varphi_n &= \varphi_n^0 + \lambda \varphi_n^1 + \lambda^2 \varphi_n^2 + \dots \\ E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \end{aligned}$$

Einsetzen in Schrödingergleichung und sortieren nach Koeffizienten ergibt folgendes Gleichungssystem

$$\begin{aligned} H^0 \varphi_n^0 &= E_n^0 \varphi_n^0 \\ H^0 \varphi_n^1 + H' \varphi_n^0 &= E_n^0 \varphi_n^1 + E_n^1 \varphi_n^0 \\ H^0 \varphi_n^2 + H' \varphi_n^1 &= E_n^0 \varphi_n^2 + E_n^1 \varphi_n^1 + E_n^2 \varphi_n^0 \\ &\vdots \end{aligned}$$

Falls man nur an E_n^1 interessiert ist, und danach die Entwicklung abbricht erhält man

Störungstheorie 1.ter Ordnung

$$E_n^1 = \langle \varphi_n^0 | H' | \varphi_n^0 \rangle$$

- $E_n \approx E_n^0 + E_n^1$
- $\varphi_n \approx \varphi_n^0$

Störungstheorie 2.ter Ordnung

$$\begin{aligned} E_n^2 &= \langle \varphi_n^0 | H' | \varphi_n^1 \rangle \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \varphi_n^0 | H' | \varphi_m^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \\ \varphi_n^1 &= \sum_{m \neq n} \frac{\langle \varphi_m^0 | H' | \varphi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \varphi_m^0 \end{aligned}$$

- $E_n \approx E_n^0 + E_n^1 + E_n^2$
- $\varphi_n \approx \varphi_n^0 + \varphi_n^1$
- Allgemein:
Für Störungstheorie n -ter Ordnung in der Energie benötigt man Störungstheorie $(n-1)$ -ter Ordnung in den Eigenfunktionen

6.2 Entartete Störungstheorie

gegeben

$$\varphi^0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_{\alpha_i}^0$$

ist Eigenfunktion für alle α_i zu Eigenwert E^0

$$H^0 \varphi^0 = E^0 \varphi^0$$

- Es gelte das die φ_{α_i} orthonormal sind

$$\langle \varphi_{\alpha_i} | \varphi_{\alpha_j} \rangle = \delta_{\alpha_i \alpha_j}$$

Löse das Eigenwertproblem

$$\hat{W}(\alpha_i) = E^1(\alpha_i)$$

mit

$$\hat{W} = (\langle \varphi_i^0 | H' | \varphi_j^0 \rangle)_{i,j}$$

- Sei $\tilde{\alpha} = (\tilde{\alpha}_i)$ Eigenvektor zum Eigenwert \tilde{E}^1

$$\varphi^0 = \sum_{i=1}^n \tilde{\alpha}_i \varphi_{\alpha_i}^0$$

ist Eigenfunktion von $H + H'$ zur Energie $E^0 + \tilde{E}^1$

7 Variationsverfahren

7.1 Obere Schranke

Gegeben

$$H \varphi_n = E \varphi_n$$

- Nähern φ_n durch normierte parameterisierte Wellenfunktion $\phi[a_i]$ mit a_i als Parameter
- Entwickele ϕ in der φ_n Basis

$$\phi[a_i] = \sum_k c_k \varphi_k$$

Erwartungswert der Energie ist

$$E[\phi] = \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$$

Es gilt

$$E[\phi] - E_0 = \frac{\sum_k |c_k|^2 (E_k - E_0)}{\sum_k |c_k|^2} \geq 0$$

- dies ist genau dann = 0, wenn $\phi = \varphi_0$ ist.
- wir haben also eine obere Schranke für die Energie.

7.2 Spin / Drehimpuls Kopplung

Kopplung von 2 beliebigen Drehimpulsen (j_1, j_2)

$$\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$$

ist wieder ein Drehimpuls. Es gilt

$$\begin{aligned} J^2 |jm\rangle &= j(j+1) \hbar^2 |jm\rangle \\ J_z |jm\rangle &= m_j \hbar |jm\rangle \end{aligned}$$

mit

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$

und wie gehabt

$$j \leq m_j \leq j$$

- Addition von n Spins in gleicher Richtung
⇒ immer symmetrisch gegen index Vertauschung
- Addition von 2 gleichen entgegengesetzten Spins
⇒ antisymmetrisch gegen index Vertauschung

8 Zeitabhängige Störungstheorie

wir betrachten ein betrachten ein 2 Zustandssystem mit

$$\begin{aligned} H_0 \psi_a &= E_a \psi_a \\ H_0 \psi_b &= E_b \psi_b \end{aligned}$$

mit orthonormalen zeitunabhängigen ψ_a, ψ_b . Ein beliebiger Zustand ist also gegeben durch

$$\Psi(t) = c_a \psi_a e^{-\frac{i}{\hbar} E_a t} + c_b \psi_b e^{-\frac{i}{\hbar} E_b t}$$

mit zeitunabhängigen c_a, c_b für die gilt $|c_a|^2 + |c_b|^2 = 1$

Schalten zeitabhängige Störung ein

$$H = H_0 + H'(t)$$

Annahme

$$\psi_a, \psi_b$$

spannen den Hilbert-Raum von H auf. Das bedeutet das die Wirkung von H' c_a, c_b zeitabhängig macht.

Lösen des Gleichungssystems

$$\begin{aligned} \dot{c}_a &= -\frac{i}{\hbar} (c_a(t) H'_{aa}(t) + c_b(t) H'_{ab}(t) e^{-i\omega_0 t}) \\ \dot{c}_b &= -\frac{i}{\hbar} (c_b(t) H'_{bb}(t) + c_a(t) H'_{ba}(t) e^{+i\omega_0 t}) \end{aligned}$$

mit der Bohrfrequenz

$$\omega_0 = \frac{E_b - E_a}{\hbar}$$

und

$$\langle \psi_i | H'(t) | \psi_j \rangle = H'_{ij}(t)$$

Es gilt $H'_{ij} = (H'_{ji})^*$

Lösen durch Iteration (Picard Lindelöf) liefert kann bei der Randbedingung

$$H'_{aa} = H'_{bb} = 0$$

bei Annahme

$$\begin{aligned} c_a^{(0)}(t) &= 1 \\ c_b^{(0)}(t) &= 0 \end{aligned}$$

zu den folgenden ersten Iterationsgliedern

$$\begin{aligned} c_a^{(1)}(t) &= 1 \\ c_b^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt' \end{aligned}$$

$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^t H'_{ab}(t') e^{-i\omega_0 t'} \int_0^{t'} H'_{ba}(t'') e^{i\omega_0 t''} dt'' dt'$$

$$c_b^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt'$$

Index

- Angeregte Zustände, 3
- Antisymmetrische Wellenfunktion, 11
- Austauschoperator, 11

- Bahndrehimpuls, 9
- Basiswechsel, 7
- Bosonen, 9, 11
- Broglie, de, 2

- de Broglie, 2
- diskretes-Spektrum, 7
- Drehimpuls, 9

- Ehrenfest Theorem, 8
- Eigenfunktion, 6
- Einsoperator, 7
- Ereigniss, 2
- Erwartungswert, 2

- Fermionen, 9, 11
- Fourier Basis, 4
- Fourier-Transformation, 8
- freie Teilchen, 5
- Funktionenräume, 6

- gebundener Zustand, 3
- Grundzustand, 3

- Hermite Polynome, 5
- hermitesche Operatoren, 6
- Hilbertraum, 7

- Identische Teilchen, 11
- Impuls, 2

- Kastenpotential, 4
- Kinetische Energie, 3
- Kollabiert, 2
- kontinuierlich, 2
- kontinuierliches Spektrum, 7

- Laquerre Polynome, 10

- Mittelwert, 2

- Normierung, 2
- Normierungsbedingung, 2

- Operatoren, 6
- Orthonormalsystem, 4

- Pauli Matrizen, 10
- Pauli Prinzip, 11
- Potentialtopf, 6
- Projektor, 7

- Reflexionskoeffizient, 5
- Rydberg-Konstante, 10

- Schrödinger Gleichung, 2
- Skalarprodukt, 6

- sphärische Bessel Funktion, 10
- sphärische von Neumann Funktion, 10
- Spin, 9
- Spin Kopplung, 12
- Störungstheorie, 11, 12
- Standardabweichung, 2
- Symmetrische Wellenfunktion, 11

- Transmissionskoeffizient, 5

- Unschärfe, 8
- Unschärferelation, 3

- Varianz, 2
- Variationsverfahren, 12
- Verteilung, 2

- Wahrscheinlichkeit, 2
- Wahrscheinlichkeitsdichte, 2
- Wahrscheinlichkeitsdichten, 2
- Wahrscheinlichkeitsverteilung, 2
- Wasserstoff Atom, 10
- Wellenfunktion, 2

- Zeitunabhängige Schrödingergleichung, 3