Prof. G. Münster

Merkblatt zur Quantentheorie

Grundlagen

Freie Materiewellen, de Broglie-Beziehungen: $\vec{p} = \hbar\vec{k}\,,\quad E = \hbar\omega\,,\qquad p = h/\lambda$

ebene Wellen: $\psi(\vec{r},t) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\quad$ mit $\quad\omega = \dfrac{\hbar}{2m}k^2$

Wellenpakete: $\psi(\vec{r},t) = \displaystyle\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\varphi(\vec{k}\,)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,,$ zerfließen mit der Zeit

Wahrscheinlichkeitsinterpretation: $|\psi(\vec{r},t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, das Teilchen bei einer Ortsbestimmung am Punkt $\vec{r}$ zu finden.

Normierung: $\int d^3r\,|\psi(\vec{r},t)|^2 = 1$

Erwartungswerte: $\langle A\rangle = \int d^3r\,\psi^*(\vec{r},t)\,A\,\psi(\vec{r},t)$

Impulsraum: $\psi(\vec{r},t) = \displaystyle\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\widetilde{\psi}(\vec{k},t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$

Impuls-Operator: $\vec{P} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla,\qquad$ Orts-Operator: $\vec{Q}\,\psi(\vec{r}\,) = \vec{r}\,\psi(\vec{r}\,)$

Breiten: $(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2\,,\qquad(\Delta p)^2 = \langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2$

Heisenberg'sche Unschärferelation: $\Delta p\cdot\Delta x \geq \frac{\hbar}{2}$

Schrödinger-Gleichung

allgemein: $\boxed{\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = H\psi(\vec{r},t)}$

Teilchen im Potenzial: $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \left(\dfrac{\vec{P}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r}\,)\right)\psi(\vec{r},t)$

Hamilton-Operator $\quad H = \dfrac{\vec{P}^{\,2}}{2m} + V(\vec{Q})$

Kontinuitätsgleichung: $\dfrac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r},t) + \nabla\cdot\vec{j}(\vec{r},t) = 0\quad$ mit $\rho = \psi^*\psi\,,\quad\vec{j} = \dfrac{\hbar}{2m\,\mathrm{i}}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$

Superpositionsprinzip: für Zustände ψ_1,ψ_2 ist $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$ wieder ein physikalischer Zustand.

Stationäre Zustände: $\psi(\vec{r},t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{Et}{\hbar}}\,\psi(\vec{r}\,)$

Zeitunabhängige (stationäre) Schrödinger-Gleichung: $\boxed{H\psi(\vec{r}\,) = E\,\psi(\vec{r}\,)}$

Wellenmechanik in einer Dimension

Rand-/Anschluss-Bedingungen: $\psi(x)$ ist stetig. $\psi'(x)$ ist stetig, wenn $|V(x)| < \infty$ überall.

Teilchen im Kasten, unendlich hoher Potenzialtopf:
$E_n = \dfrac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\cdot n^2\,,\quad\psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{L}}\,\sin\left(\dfrac{n\pi}{L}x\right)\,,\quad n = 1,2,3,\ldots$

Endlicher Potenzialtopf:
diskretes Spektrum: endlich viele gebundene Zustände
kontinuierliches Spektrum: Streuzustände
Transmissionskoeffizient: $T = \left|\frac{j_T}{j_{\mathrm{ein}}}\right|$, Reflexionskoeffizient: $R = \left|\frac{j_R}{j_{\mathrm{ein}}}\right|$, $\quad T + R = 1$

Resonanzen: Breit-Wigner-Funktion $T \approx \dfrac{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}{(E-E_R)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}$

Potenzialbarriere, Tunneleffekt: Gamow-Faktor $T \approx \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int\limits_a^b \sqrt{2m(V(x)-E)}\,dx\right\}$

Allgemeine eindimensionale Potenziale:
a) klassisch erlaubt: $E > V(x)$, ψ ist oszillatorisch
b) klassisch verboten: $E < V(x)$, ψ ist von der Achse weggekrümmt, speziell: exponentielles Abklingen
c) klassische Umkehrpunkte: $E = V(x)$, $\psi''(x) = 0$

Harmonischer Oszillator:

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}Q^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right), \qquad [a, a^\dagger] = 1$$

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle\,, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$$\varphi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\,H_n(y)\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}y^2}$$

Mathematischer Formalismus

Hilbert-Raum $\mathcal{H} = L_2\,(\mathbf{R})$ bzw. $L_2(\mathbf{R}^3)$, $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int d^3r\ \psi_1^*(\vec{r})\psi_2(\vec{r})$, $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle < \infty$

Orthonormalbasis: $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$, Vollständigkeit: $|\psi\rangle = \sum\limits_n c_n|n\rangle$ mit $c_n = \langle n|\psi\rangle$

Vollständigkeitsrelation: $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}$

Observable $\leftrightarrow$ selbstadjungierte Operatoren $A^\dagger = A$
Messwerte = Eigenwerte sind reell
Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal

Vollständigkeit: die eigentlichen und uneigentlichen Eigenvektoren spannen den ganzen Hilbert-Raum auf.

Erwartungswerte: $\langle\psi|A|\psi\rangle$

A und B sind verträglich (kommensurabel) $\Leftrightarrow$ $AB - BA = 0$

Kommutator $[A, B] = AB - BA$, Born-Jordan: $[P_j, Q_k] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\,\delta_{jk}\,\mathbf{1}$

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

Uneigentliche Impuls-Eigenvektoren: $|k\rangle \leftrightarrow \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$
Uneigentliche Orts-Eigenvektoren: $|q\rangle \leftrightarrow \delta(x-q)$, $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$

Zeitliche Entwicklung

Zeitentwicklungs-Operator $U(t) = \exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht)$

Schrödinger-Bild: $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$, $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$

Heisenberg-Bild: $|\psi_H\rangle = U^\dagger(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle$, $A_H(t) = U^\dagger(t)AU(t)$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_H(t) = [A_H(t), H] + \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}A_H(t)$$

A ist Erhaltungsgröße $\Longleftrightarrow [A, H] = 0$.

Drehimpuls

Drehimpuls-Operator: $\vec{L} = \vec{Q} \times \vec{P}$, $[L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}L_k$

$\vec{L}^2|l,m\rangle = \hbar^2\,l(l+1)|l,m\rangle\,,$ $L_3|l,m\rangle = \hbar m|l,m\rangle$ mit $l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \dots\}$, $m \in \{l, l-1, \dots, -l\}$

Bahndrehimpuls: $l \in \{0, 1, 2, 3, \dots\}$

Teilchen im Zentralpotenzial: $\psi(\vec{r}) = f(r)\, Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$

Radiale Schrödinger-Gleichung:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right) u(r) = Eu(r), \quad \text{wobei } u(r) = rf(r)$$

$u \sim r^{l+1}$ für $r \to 0$

Zweiatomige Moleküle: $E \approx V(r_l) + \dfrac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_l^2} + \hbar\omega_l(n + \frac{1}{2})$

Wasserstoff-Atom

$$V(r) = -\frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}, \quad H|n\,l\,m\rangle = E_n|n\,l\,m\rangle\,, \quad E_n = -\frac{me_0^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\,, \quad l \leq n-1\,, \quad |m| \leq l$$

Teilchen im elektromagnetischen Feld

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{P} - e\vec{A}\right)^2 + e\Phi\,, \qquad \text{Normaler Zeeman-Effekt:} \quad E = E_n + \hbar\omega_L \cdot m_l\,, \quad \omega_L = \frac{e_0 B}{2m}$$

Spin

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma}\,, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Pauli-Gleichung: $\mathrm{i}\,\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r},t) \\ \psi_-(\vec{r},t) \end{pmatrix} = \left\{\dfrac{1}{2m}\left(\vec{P} - e\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2 + e\Phi(\vec{r},t) - \dfrac{e\hbar}{2m}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{B}(\vec{r},t)\right\}\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r},t) \\ \psi_-(\vec{r},t) \end{pmatrix}$

Addition von Drehimpulsen: $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$

Zeitunabhängige nichtentartete Störungstheorie

$$H = H_0 + \lambda H_1\,, \quad E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \ldots\,, \quad E_n^1 = \langle n^0|H_1|n^0\rangle\,, \quad E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{|\langle m^0|H_1|n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

Feinstruktur des Wasserstoff-Spektrums:

$$H_1 = -\frac{1}{8m^3c^2}\left(\vec{P}^{\,2}\right)^2 + \frac{1}{2m^2c^2}\;\vec{S}\cdot\vec{L}\;\frac{\gamma}{R^3} + \frac{\pi\hbar^2\gamma}{2m^2c^2}\;\delta^{(3)}(\vec{Q}\,)\,, \qquad \left(\gamma = \frac{e_0^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)$$

$$E_{nj} = -mc^2\,\frac{\alpha^2}{2n^2}\left\{1 - \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right)\right\} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c(4\pi\varepsilon_0)}$$

Mehrere Teilchen

Ausschließungsprinzip (Pauli-Verbot): Jeder Ein-Teilchen-Zustand kann höchstens von einem Elektron besetzt werden.

Pauli-Prinzip: Die Wellenfunktion eines Systems von Elektronen ist total antisymmetrisch.

Orthohelium: Gesamtspin 1, Ortsfunktion antisymmetrisch
Parahelium: Gesamtspin 0, Ortsfunktion symmetrisch, Grundzustand

Ritz'sches Variationsverfahren: $E_0 = \inf\limits_{\psi}\dfrac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$

Zeitabhängige Störungstheorie

$$H(t) = H_0 + H_1(t)\,, \quad |\psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t)|k\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t}\,, \quad c_k(t) = \delta_{kn} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t dt'\langle k|H_1(t')|n\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega_n - \omega_k)t'}$$

Fermi's goldene Regel: $W_{n\to\alpha} = \dfrac{2\pi}{\hbar}\rho(E_n)|\langle\alpha|H_1|n\rangle|^2$

Absorption und induzierte Emission: $W_{n\to m} = \dfrac{4\pi^2}{\hbar^2(4\pi\varepsilon_0)}\;u(\omega_{mn})\;|\langle m|\vec{e}\cdot\vec{d}|n\rangle|^2$

Statistischer Operator

$$\langle A\rangle = \mathrm{Sp}(\rho A)\,, \quad \mathrm{Sp}(\rho) = 1\,, \quad \mathrm{Sp}(\rho^2) \le 1\,, \quad \mathrm{Sp}(\rho^2) = 1 \;\Leftrightarrow\; \rho \text{ ist reiner Zustand.}$$

Stationäre Streutheorie

$$\varphi(\vec{r}\,) \longrightarrow \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + f(\vartheta)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\,, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\,, \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2$$

$$f(\vartheta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}\,\sin\delta_l\,P_l(\cos\vartheta)\,, \quad \sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,\sin^2\delta_l\,, \quad \sigma = \frac{4\pi}{k}\,\mathrm{Im}\,f(0)$$

Born'sche Näherung: $\quad f^{(1)}(\vartheta,\varphi) = -\dfrac{m}{2\pi\hbar^2}\displaystyle\int d^3r'\,V(\vec{r}\,')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot\vec{r}\,'}$

Pfadintegrale

$$\langle x|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht}|y\rangle = \int\mathcal{D}x\;\mathrm{e}^{\mathrm{i}S[x]}$$

$$Z_E[j] = \frac{1}{Z}\int\mathcal{D}x\;\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(x,Ax)+(j,x)} = \exp\left\{\frac{1}{2}\,(j,A^{-1}j)\right\}$$