Prof. G. Münster

Merkblatt zur Quantentheorie für Lehramtsstudierende und Informatiker/innen

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: $R = \left|\frac{j_R}{j_{\mathrm{ein}}}\right|$, $T + R = 1$

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

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: $E = V(x)$, $\quad \psi''(x) = 0$

Harmonischer Oszillator:

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

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

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

Mathematischer Formalismus

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

Orthonormalbasis: $\quad (\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn}, \qquad$ Vollständigkeit: $\quad \varphi = \sum\limits_n c_n\varphi_n \quad$ mit $c_n = (\varphi_n, \varphi)$

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: $\quad (\psi, A\psi)$

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

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

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

Drehimpuls

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

$$\vec{L}^2\varphi_{lm} = \hbar^2\, l(l+1)\varphi_{lm}\,, \quad L_3\,\varphi_{lm} = \hbar m\,\varphi_{lm} \quad \text{mit } l \in \{0, \tfrac{1}{2}, 1, \dots\}, \quad m \in \{l, l-1, \dots, -l\}$$

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

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

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

Wasserstoff-Atom

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

Spin

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

Spinor-Wellenfunktionen: $\begin{pmatrix} \psi_+(\vec{r},t) \\ \psi_-(\vec{r},t) \end{pmatrix}$

Pauli-Term: $H_{\mathrm{Spin}} = -\dfrac{e\hbar}{2m}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$

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

Näherungsmethoden

Zeitunabhängige nichtentartete Störungstheorie:

$$H = H_0 + \lambda H_1\,, \quad E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \dots\,, \quad E_n^1 = \langle n^0|H_1|n^0\rangle$$

Feinstruktur des Wasserstoff-Spektrums:

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

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