

Merkblatt zur Quantenmechanik

Grundlagen

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

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

Wellenpakete: $\psi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \varphi(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$, 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: $\int d^3 r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$

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

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

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

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

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

Schrödinger-Gleichung

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

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

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

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

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

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

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:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Endlicher Potenzialtopf:

diskretes Spektrum: endlich viele gebundene Zustände

kontinuierliches Spektrum: Streuzustände

Transmissionskoeffizient: $T = \left| \frac{j_T}{j_{\text{ein}}} \right|$, Reflexionskoeffizient: $R = \left| \frac{j_R}{j_{\text{ein}}} \right|$, $T + R = 1$

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

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

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:

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

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

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

Mathematischer Formalismus

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

Orthonormalbasis: $(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn}$, Vollständigkeit: $\varphi = \sum_n c_n \varphi_n$ 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: $(\psi, A\psi)$

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

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

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

Drehimpuls

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

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

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

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

Radiale Schrödinger-Gleichung:

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

$u \sim r^{l+1}$ für $r \rightarrow 0$

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

Wasserstoff-Atom

$$V(r) = -\frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, \quad H\varphi_{nlm} = E_n \varphi_{nlm}, \quad E_n = -\frac{me_0^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad l \leq n-1, \quad |m| \leq l$$

Spin

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

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

Pauli-Term:
$$H_{\text{Spin}} = -\frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

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:

$$E_{nj} = -mc^2 \frac{\alpha^2}{2n^2} \left\{ 1 - \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{j + \frac{1}{2}} \right) \right\} \quad \text{mit} \quad \alpha = \frac{e_0^2}{\hbar c (4\pi\epsilon_0)}$$

Ritz'sches Variationsverfahren:
$$E_0 = \inf_{\psi} \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$