

THEORETISCHE PHYSIK D - ZUSAMMENFASSUNG

Diese Zusammenfassung erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit oder Korrektheit.

Solltet ihr Fehler finden oder Ergänzungen haben, teilt sie mir bitte mit: richard.gebauer@student.kit.edu

1 Grundlagen

Hinweis: Bei Rechnungen mit EM-Feldern wurde in der Vorlesung das Gauß-System verwendet, deshalb sind diese Formeln hier auch in Gauß notiert.

1.1 De Brogliesche-Materiewellen

Wellenlänge

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Energie

$$E = hf = \hbar \cdot \omega \stackrel{\text{n.r.}}{=} \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

Wellenzahlvektor

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \quad k = |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

1.2 Dirac-Notation (Bra-Ket-Schreibweise)

$$\text{Skalarprodukt (Bracket)} \quad \langle \psi | \phi \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}) \cdot \phi(\vec{r})$$

mit abstraktem Funktional $\langle \psi |$ (Bra), das auf eine abstrakte Funktion $|\phi\rangle$ (Ket) wirkt.

Verschiedene Darstellungen

$$\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle \quad (\text{d.h. die } \Psi\text{-Funktion in Abhängigkeit des Ortes})$$

$$\Psi(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \Psi \rangle \quad (\text{d.h. die } \Psi\text{-Funktion in Abhängigkeit des Impulses})$$

Eigenfunktionen

$$|\Psi_n\rangle =: |n\rangle \quad (\text{d.h. die } n\text{-te Eigenfunktion})$$

$$|\Psi_{\vec{p}}\rangle =: |\vec{p}\rangle \quad (\text{d.h. die Eigenfunktion zum Eigenwert } \vec{p})$$

Orts-Impuls-Relation

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \Psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}\right)$$

$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle$ beschreibt die Eigenfunktion zum Impuls \vec{p} in Abhängigkeit des Ortes \vec{r} .

1.3 Operatoren

wirken immer nur auf Zustände $|\cdot\rangle$, nicht aber auf Zahlen/Konstanten.

Impuls-Operator

$$\text{Ortsdarstellung: } \langle \vec{r} | \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla_{\vec{r}} \langle \vec{r} |$$

$$\text{Impulsdarstellung: } \langle \vec{p} | \hat{p} = \vec{p} \langle \vec{p} |$$

Orts-Operator

$$\begin{aligned} \text{Ortsdarstellung: } & \langle \vec{r} | \hat{r} = \vec{r} \langle \vec{r} | \\ \text{Impulsdarstellung: } & \langle \vec{p} | \hat{r} = i\hbar \nabla_{\vec{p}} \langle \vec{p} | \end{aligned}$$

Hamilton-Operatoren (Energie-Operator) für verschiedene Probleme

Kurz zusammengefasst, für ausführlichere Beschreibung, siehe die entsprechenden Abschnitte.

Problem	Hamilton-Operator
Freies Teilchen	$\hat{H} = \hat{T} = \hat{p}^2/2m$
.. mit Potential	$\hat{H} = \hat{p}^2/2m + \hat{V}(\hat{r})$
Bewegung auf Kreisbahn	$\hat{H} = \frac{L_z^2}{2mR^2}$
Teilchen im Zentralfeld	$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p}_r^2 + \frac{\hbar^2}{r^2} l(l+1) + V(r) \right)$
Drehimpuls ¹	$\hat{H} = -\vec{m}\vec{B} = -\gamma\vec{B}\hat{L} = -g\mu\vec{B}\hat{L}/\hbar$
Spin	$\hat{H} = -\gamma\vec{B}\vec{S} = -\mu_B\vec{B}\vec{\sigma}$
Teilchen in EM-Feld	$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 + e\varphi$

Allg.: Bestimme Hamilton-Funktion (vgl. Theo B) und ersetze Koordinaten durch zugeh. Operatoren.

Adjungierter Operator

Für jeden Operator \hat{O} existiert ein adjungierter Operator \hat{O}^\dagger , sodass gilt:

$$\langle \psi | \hat{O} \phi \rangle = \langle \hat{O}^\dagger \psi | \phi \rangle \quad \text{für alle } \psi, \phi$$

Selbstadjungierter Operator

Ein Operator ist selbstadjungiert (hier auch hermitesch genannt), falls gilt: $\hat{O} = \hat{O}^\dagger$. Sie besitzen immer eine Menge von orthogonalen Eigenfunktionen, d.h. o.E. gilt:

$$\langle n | m \rangle = \delta_{n,m} .$$

Die Eigenwerte dieser Eigenfunktionen sind reell, also $\hat{O} |n\rangle = o_n |n\rangle$ mit $o_n \in \mathbb{R}$. Weiter erfüllen sie die Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_n \langle n | \vec{r} \rangle \langle \vec{r}' | n \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad \text{bzw. allgemeiner} \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$$

Erwartungswert

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \Psi | \hat{O} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{O} \Psi \rangle = \int d^3r \Psi^*(\vec{r}) \cdot \hat{O} \Psi(\vec{r})$$

Messbarkeit

\hat{O} ist messbar, wenn $\langle \hat{O} \rangle$ reell ist. Dies ist nur für hermitesche Operatoren ($\hat{O} = \hat{O}^\dagger$) der Fall.

¹Kam so allgemein nicht in der VL, aber wichtig für \vec{B} -Feld-Wechselwirkung mit dem Bahndrehimpuls: \vec{m} ist das magnetische Moment; g ist der Landé-Faktor ($g \approx 2$ für Elektronen); $\mu = \frac{Q\hbar}{2M}$ ist das Magneton des Teilchens (z.B. $\mu = \mu_B$ Bohrsches Magneton für Elektronen).

Weitere nützliche Relationen

$$\int d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \mathbb{1}$$

$$\int d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = \mathbb{1}$$

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Kommutator

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

Erhaltungsgrößen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{O} \rangle = \langle [\hat{O}, \hat{H}] \rangle$$

Somit stellt \hat{O} eine Erhaltungsgröße (zeitlich konstant) dar, falls gilt:

$$[\hat{O}, \hat{H}] = 0$$

(Spezialfall des Ehrenfest-Theorems: Gilt nur falls $\langle \partial_t \hat{O} \rangle = 0$)

Orts-Impuls-Kommutator

$$[\hat{x}_j, \hat{x}_k] = [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0 \quad , \quad [\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar \delta_{j,k}$$

1.4 Wahrscheinlichkeiten**Projektor: diskrete Zustände**

projiziert einen bel. Zustand $|\Psi\rangle$ auf den Eigenzustand $|n\rangle$:

$$\hat{P}_n = |n\rangle \langle n|$$

Es gilt dann:

$$\hat{P}_n \hat{P}_m = \delta_{nm} \hat{P}_n \quad ; \quad \hat{A} |n\rangle = a_n |n\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{A} \hat{P}_n |\Psi\rangle = a_n \hat{P}_n |\Psi\rangle \quad \text{für beliebiges } \Psi$$

Wahrscheinlichkeit: diskrete Zustände

Wahrscheinlichkeit, den Zustand $|\Psi\rangle$ im Eigenzustand $|n\rangle$ zu messen, ist:

$$P_{|\Psi\rangle}(n) = |\langle n | \Psi \rangle|^2 = \langle \Psi | \hat{P}_n | \Psi \rangle = \langle \hat{P}_n \rangle$$

Projektor: kontinuierliche Zustände

projiziert einen bel. Zustand $|\Psi\rangle$ auf die Eigenzustände $|b\rangle$ im Bereich $[\alpha, \beta]$:

$$\hat{P}_{[\alpha, \beta]} = \int_{\alpha}^{\beta} db |b\rangle \langle b|$$

Hier gilt:

$$\hat{P}_{[\alpha, \beta]} \hat{P}_{[\gamma, \delta]} = \hat{P}_{[\alpha, \beta] \cap [\gamma, \delta]}$$

Wahrscheinlichkeit: kontinuierliche Zustände

Wahrscheinlichkeit, den Zustand $|\Psi\rangle$ in einem Eigenzustand $|b\rangle$ mit $b \in [\alpha, \beta]$ zu messen:

$$\hat{P}_{|\Psi\rangle}([\alpha, \beta]) = \int_{\alpha}^{\beta} db |\langle b | \Psi \rangle|^2 = \langle \Psi | \hat{P}_{[\alpha, \beta]} | \Psi \rangle = \langle \hat{P}_{[\alpha, \beta]} \rangle$$

1.5 Schrödinger-Gleichung

Allgemeine Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad \text{mit Hamilton-Operator } \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

Stationäre Schrödingergleichung

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$$

E sind Eigenwerte des Hamilton-Operators \hat{H} . Wir suchen Funktionen $|\Psi\rangle$ (und zugehörige Eigenwerte), die dieses Eigenwertproblem lösen.

Aus der Lösung der zeitunabhängigen SG ergibt sich die Zeitabhängigkeit durch:

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) |\Psi\rangle$$

1.6 Ehrenfest-Theorem

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

Ehrenfest-Gleichungen

Speziell für $\hat{O} = \hat{r}$ bedeutet dies für $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ wegen $\partial_t \hat{r} = 0$ und $[\hat{H}, \hat{r}] = \frac{\hbar \hat{p}}{mi}$:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{r} \rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}$$

Für die Kraft ($\hat{O} = \hat{p}$) folgt in diesem Fall analog:

$$\langle \vec{F} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = -\langle \nabla V \rangle$$

1.7 Exakte Messbarkeit und Unschärfe

Unschärfe

Varianz: Die mittlere (quadratische) Abweichung einer Messgröße \hat{O} von deren Erwartungswert $\langle \hat{O} \rangle$:

$$\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle = \langle (\hat{O} - \langle \hat{O} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{O}^2 \rangle - \langle \hat{O} \rangle^2$$

Exakte Messbarkeit

Um eine Observable \hat{O} scharf messen zu können, muss der aktuelle Zustand $|\Psi\rangle$ eine Eigenfunktion sein:

$$\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle = 0 \Leftrightarrow \hat{O} |\Psi\rangle = \langle \hat{O} \rangle |\Psi\rangle$$

(Bem.: Sofern eine vollständige Basis von Eigenfunktionen von \hat{O} existiert, kann \hat{O} in jedem Zustand (alleine) exakt gemessen werden, da sich $|\Psi\rangle$ als Linearkombination dieser Basis schreiben lässt.)

Simultane Messbarkeit

Zwei Operatoren \hat{O} und \hat{P} können genau dann gleichzeitig scharf gemessen werden, wenn sie gemeinsame Eigenfunktionen besitzen:

$$\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle = 0 \quad \text{und} \quad \langle (\Delta \hat{P})^2 \rangle = 0 \Leftrightarrow [\hat{O}, \hat{P}] = 0$$

$[\hat{O}, \hat{P}] = 0$ ist hierbei äquivalent zur Existenz gemeinsamer Eigenfunktionen.

Heisenbergsche Unschärferelation

Möchte man zwei Observablen zeitgleich messen, die nicht die selben Eigenfunktionen besitzen, ergibt sich hierbei notwendigerweise eine Unschärfe:

$$\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{P})^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{O}, \hat{P}] \rangle|^2$$

Orts-Impuls-Unschärfe

$$\langle (\Delta \hat{p}_\alpha)^2 \rangle \langle (\Delta \hat{r}_\beta)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \delta_{\alpha,\beta}$$

Mit der Standardabweichung $\Delta O = \sqrt{\langle (\Delta \hat{O})^2 \rangle}$ erhält man in einer Dimension die bekannte Beziehung:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar/2$$

1.8 Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$

Kontinuitätsgleichung

wird vom Wahrscheinlichkeitsstrom erfüllt: (mit $\rho = |\Psi|^2$)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = 0$$

1.9 Parität

$$\text{Paritätsoperator } \hat{P}\Psi(x) = \Psi(-x)$$

\hat{P} ist selbstadjungiert und es gilt:

$$V(x) = V(-x) \Leftrightarrow [\hat{P}, \hat{H}] = 0 \Leftrightarrow \hat{P} \text{ und } \hat{H} \text{ haben gemeinsame Eigenfunktionen}$$

Eigenfunktionen von \hat{P} sind die geraden und ungeraden Funktionen:

$$\psi(x) = \psi(-x) \quad (\hat{P}\psi(x) = \psi(x), \text{ EW } 1) \quad \text{und} \quad \psi(x) = -\psi(-x) \quad (\hat{P}\psi(x) = -\psi(x), \text{ EW } -1)$$

Falls also $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$, haben die Energie-Eigenzustände gegebene Parität:

$$\hat{H}\phi_n = E_n\phi_n \quad ; \quad \phi_n(x) = \pm\phi_n(-x)$$

2 Erste quantenmechanische Probleme

2.1 Unendlich tiefer Potentialtopf (1D)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } |x| \leq \alpha/2 \\ \infty & \text{falls } |x| > \alpha/2 \end{cases}$$

Schrödingergl. ist lokal: In jedem Bereich einzeln lösen. Dann Randbedingung (Stetigkeit) beachten.

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \cos\left(\frac{n\pi}{\alpha}x\right) & \text{falls } n \text{ ungerade} \\ \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \sin\left(\frac{n\pi}{\alpha}x\right) & \text{falls } n \text{ gerade} \end{cases} \quad (n \in \mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\})$$

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

2.2 Harmonischer Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{k}{2} x^2 \quad \text{mit } k = m\omega^2$$

Lösung der stationären Schrödingergleichung

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (n \in \mathbb{N}_0)$$

Hierbei wurden die Hermite-Polynome verwendet:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x^2} \right)$$

Dimensionslose Länge und Energie

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \cdot x$$

$$\epsilon = \frac{2}{\hbar\omega} \cdot E$$

Mit dieser Substitution erhalten wir aus der stationären SG folgende DGL:

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \Psi(\xi) + (\epsilon - \xi^2) \Psi(\xi) = 0$$

deren Lösung die Hermite-Funktionen sind:

$$h_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} H_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \quad (n \in \mathbb{N}_0)$$

mit den Hermite-Polynomen (andere Formulierung als oben):

$$H_n(\xi) = \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right) \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$$

Auf- und Absteige-Operator

$$\text{Absteige-Operator } \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

$$\text{Aufsteige-Operator } \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right)$$

$$\text{Besetzungszahloperator } \hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

Die anderen Operatoren lassen sich durch diese ausdrücken:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{p} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{m\omega}{i} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right)$$

Für die Eigenfunktionen $|n\rangle$ ($n \in \mathbb{N}_0$) des Hamilton-Operators gilt:

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle \quad , \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad , \quad \hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \quad , \quad \langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$$

Mehrdimensionaler harmonischer Oszillator (vgl. Blatt 5)

$$\hat{H} = \sum_j \left(\frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}_j^2 \right)$$

Die Lösung der stationären Schrödingergleichung ist:

$$\langle \vec{x} | \{n_j\} \rangle = \prod_j \langle x_j | n_j \rangle \quad \text{mit eindimensionaler Lösung in Richtung } j: |n_j\rangle$$

$$E_{\{n_j\}} = \hbar\omega \sum_j \left(n_j + \frac{1}{2} \right)$$

Weitere nützliche Relationen der Operatoren sind:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] &= \delta_{j,k} \quad , \quad [\hat{a}_j, \hat{a}_k] = [\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger] = 0 \quad , \quad \hat{H} = \hbar\omega \sum_j \left(\hat{N}_j + \frac{1}{2} \right) \\ [\hat{N}_j, \hat{a}_k] &= -\hat{a}_j \delta_{j,k} \quad , \quad [\hat{N}_j, \hat{a}_k^\dagger] = \hat{a}_j^\dagger \delta_{j,k} \quad , \quad [\hat{N}_j, \hat{N}_k] = 0 \end{aligned}$$

Ab jetzt keine Hütchen auf den Operatoren mehr... → Kontext

2.3 Stufenpotential

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$$

Fall $E > V_0$

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & x < 0 \\ C'e^{ik'x} & \text{mit } k' = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} & x \geq 0 \end{cases}$$

$$\text{Transmissionskoeffizient } T = \left| \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{inc}}} \right| = \frac{k'}{k} \left| \frac{C'}{A} \right|^2 = \frac{4\sqrt{1 - V_0/E}}{\left(1 + \sqrt{1 - V_0/E}\right)^2}$$

$$\text{Reflexionskoeffizient } R = \left| \frac{j_{\text{ref}}}{j_{\text{inc}}} \right| = \left| \frac{B}{A} \right|^2 = 1 - T$$

Ein Teil der Welle wird transmittiert. Dieser ändert jedoch seine Wellenlänge, analog zu elektromagnetischen Wellen im Medium.

Fall $E < V_0$

$$\Psi(x) = \begin{cases} A(e^{ikx} + e^{-i(kx+2\phi)}) & \text{mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & x < 0 \\ \frac{2A}{1 + i\kappa/k} e^{-\kappa x} & \text{mit } \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} & x \geq 0 \end{cases}$$

mit Phasensprung bei Reflexion $\phi = \arctan\left(\frac{\kappa}{k}\right)$.

$$\text{Reflexionskoeffizient } R = \left| \frac{j_{\text{ref}}}{j_{\text{inc}}} \right| = \left| \frac{Ae^{-2i\phi}}{A} \right|^2 = 1$$

Die komplette Welle wird (wenn auch mit Phasensprung) reflektiert. Ein Teil der Welle dringt jedoch zuvor (exponentiell abfallend) in die Potentialstufe ein (evaneszente Welle).

2.4 Rechteckige Potentialbarriere

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \begin{cases} 0 & |x| > a \\ V_0 & |x| \leq a \end{cases}$$

Fall $E > V_0$

$$\Psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & x < -a \\ Ce^{ik'x} + De^{-ik'x} & \text{mit } k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} & |x| \leq a \\ Fe^{ikx} & \text{mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & x > a \end{cases}$$

$$\text{Transmissionskoeffizient } T = \left| \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{inc}}} \right| = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(E-V_0)} \sin^2(2k'a)}$$

Beachte: $T = 1$ falls $n \cdot \lambda'/2 = 2a$ ($n \in \mathbb{N}$), die Barriere wird also unsichtbar, wenn gerade ein Vielfaches der halben Wellenlänge in die Barriere passt.

Fall $E < V_0$

$$k' = i\kappa \quad \text{mit } \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\text{Transmissionskoeffizient } T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(2\kappa a)} \stackrel{\kappa a \gg 1}{\approx} \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-4\kappa a}$$

Tunneleffekt: Obwohl die Energie nicht ausreicht, kann ein Teilchen die Barriere passieren, aber die Wahrscheinlichkeit hierfür nimmt mit zunehmender Barrierenlänge exponentiell ab.

2.5 Gebundene Zustände in einer rechteckigen Box

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \begin{cases} V_0 & \text{falls } |x| > a \\ 0 & \text{falls } |x| \leq a \end{cases}$$

Gebundener Zustand, d.h. $E < V_0$. Definieren:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad ; \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Bei Verwendung des Paritätsoperators erhält man zwei mögliche Eigenzustände:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{falls } x \leq -a \\ C \cos(kx) & \text{falls } |x| < a \\ Ae^{-\kappa x} & \text{falls } x \geq a \end{cases} \quad \text{oder} \quad \psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{falls } x \leq -a \\ C \sin(kx) & \text{falls } |x| < a \\ -Ae^{-\kappa x} & \text{falls } x \geq a \end{cases}$$

Unter Berücksichtigung von Randbedingungen (Stetige Differenzierbarkeit) erhält man:

$$\kappa = k \tan(ka) \quad \text{oder} \quad \kappa = -k \cot(ka)$$

Mit $\eta = \kappa a$ und $\xi = ka$ lassen sich diese noch in eine schönere Form bringen:

$$\eta = \xi \tan \xi \quad \text{oder} \quad \eta = -\xi \cot \xi$$

Grafisches Lösen ergibt für $\gamma^2 = \eta^2 + \xi^2$:

- $\gamma < \pi/2$: Eine gerade Lösung
- $\pi/2 < \gamma < \pi$: Eine gerade und eine ungerade Lösung
- $\pi < \gamma < 3\pi/2$: Zwei gerade und eine ungerade Lösung usw.

Und damit gibt es für $\gamma < m\pi/2$ insg. m gebundene Zustände und als Kriterium für m Zustände:

$$V_0 < E_m^\infty \quad \text{mit Energie des } m\text{-ten Zustands im unendlichen Potentialtopf } E_m^\infty$$

3 Drehimpuls und Spin

3.1 Teilchen auf einer Kreisbahn

$$H\psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(r) = E\psi(r)$$

In Zylinderkoordinaten mit $r = R = \text{const.}$ und $z = 0$ vereinfacht sich dies zu:

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\partial_\phi^2\psi(\phi) = E\psi(\phi)$$

$$\Rightarrow \psi_n(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{in\phi} \quad ; \quad E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2mR^2}$$

Aus der Randbedingung $\psi_n(\phi) = \psi_n(\phi + 2\pi)$ folgt die Quantisierung:

$$e^{in\phi} = e^{in(\phi+2\pi)} \quad \Rightarrow \quad n \in \mathbb{Z}$$

Die selbe Rechnung kann auch mit Lagrange-Funktion und Hamilton-Formalismus durchgeführt werden:

$$L(\phi, \dot{\phi}) = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 = \frac{mR^2}{2}\dot{\phi}^2$$

mit kanonischem Impuls (zur Ortskoordinate ϕ):

$$p_\phi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} = mR^2\dot{\phi}$$

Hiermit ergibt sich die Hamilton-Funktion (die auch dem Hamilton-Operator entspricht):

$$H(\phi, p_\phi) = p_\phi\dot{\phi} - L(\phi, \dot{\phi}) = \frac{mR^2}{2}\dot{\phi}^2 = \frac{p_\phi^2}{2mR^2}$$

Für kanonische Impulse gilt analog wie im Standardfall ($x \leftrightarrow p$):

$$[\phi, p_\phi] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \hat{\phi} = \phi, \quad \hat{p}_\phi = \frac{\hbar}{i}\partial_\phi$$

womit man aus der Hamilton-Funktion den Operator gewinnt:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2mR^2}\partial_\phi^2$$

3.2 Drehimpulsoperator

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

Drehimpulsinvarianz und Rotationssymmetrie

Infinitesimaler Rotationsoperator:

$$R_{\vec{\omega}} = 1 + \vec{\omega} \left(\vec{r} \times \vec{\nabla} \right) = 1 + i \frac{\vec{L} \cdot \vec{\omega}}{\hbar}$$

Für endliche Drehwinkel ω :

$$R_{\vec{\omega}} = \exp \left(i \frac{\vec{L} \cdot \vec{\omega}}{\hbar} \right)$$

Bei Rotationsinvarianz ist der Drehimpuls erhalten und Energie und Drehimpuls können gleichzeitig scharf gemessen werden ($[H, \vec{L}] = 0$).

Drehimpulsalgebra

$$[L_j, L_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}L_l \quad ; \quad [L_j, \vec{L}^2] = 0$$

Zustände mit nicht-entarteten Energiespektren haben trivialen Drehimpuls $\langle L_j \rangle = 0$.

Eigenschaften

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y \quad ; \quad J_+^{\dagger} = J_-$$

Diese Auf- und Absteigeoperatoren erfüllen:

$$[J_{\pm}, \vec{J}^2] = 0 \quad ; \quad [J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm} \quad ; \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad ; \quad \vec{J}^2 = J_- J_+ + J_z^2 + \hbar J_z$$

Für Basis von Eigenfunktionen $|j, m\rangle$ gilt:

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle \quad ; \quad J_z |j, m\rangle = \hbar m |j, m\rangle \\ J_+ |j, m\rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle \quad ; \quad J_- |j, m\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle \end{aligned}$$

Darstellung in Kugelkoordinaten

Von $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$:

$$L_x = i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad ; \quad L_y = i\hbar \left(-\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad ; \quad L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Insgesamt kann man den Laplace-Operator damit schreiben:

$$\nabla^2 = \Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \vec{L}^2$$

Für Zentralpotentiale $V(\vec{r}) = V(r)$ sieht man nun leicht ein, dass Drehimpulserhaltung $[L_{\alpha}, H] = 0$ gilt. Die Kugelflächenfunktionen (unter Nützlichem) sind die Eigenfunktionen von L_z und \vec{L}^2 .

3.3 Der Spin

Drehimpuls mit $s = 1/2$, verwenden o.B.d.A. Eigenzustände in z -Richtung:

$$s = \frac{1}{2} \quad , \quad m_s = \pm \frac{1}{2} \quad ; \quad \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Operatoren in Matrix-Schreibweise:

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ S_+ &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Es gilt wie für gewöhnliche Drehimpuls-Operatoren (was sie ja auch sind...):

$$S_z \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle \quad ; \quad \vec{S}^2 \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 \left| \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$$

Zusammengefasst:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad \text{mit Pauli-Matrizen } \vec{\sigma} = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$$

3.4 Spin im Magnetfeld

$$H = -\gamma \vec{B} \vec{S} = -\mu_B \vec{B} \vec{\sigma} \quad \text{mit gyromagnetischem Faktor } \gamma \approx \frac{e}{m_e c}$$

Bohrsches Magneton: $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c}$

Sei ab jetzt o.B.d.A.: $\vec{B} = B \vec{e}_z$

Lamor-Frequenz

$$\omega_L = \frac{2\mu_B B}{\hbar} = \frac{eB}{mc}$$

Spin rotiert mit dieser Frequenz um die z-Achse.

Eigenenergie

$$E_m = -m\hbar\omega_L \quad \text{mit } m = \pm\frac{1}{2}$$

3.5 Teilchen im äußeren elektromagnetischen Feld

Felder durch Vektorpotential \vec{A} und Skalarpotential φ beschrieben:

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} ; \quad \vec{E} = \nabla\varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

Besitzen Eichfreiheit:

$$\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \nabla f ; \quad \varphi \rightarrow \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t} \quad \text{mit beliebigem } f$$

Müssen jedoch auch Wellengleichung entsprechend umeichen:

$$\psi \rightarrow \psi \cdot \exp\left(-i \frac{e}{\hbar c} f\right)$$

Hamilton-Operator

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + e\varphi$$

3.6 Landau-Niveaus im magnetischen Feld

Vorerst ohne Spin. $\vec{B} = B\vec{e}_z$. Wahl(Eichfreiheit): $\vec{A} = B(-y, 0, 0)$, $\varphi = 0$

$$H = \frac{1}{2m} \left(\left(p_x + \frac{eB}{c} y \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right)$$

Ansatz:

$$\psi(x, y, z) = \underbrace{e^{i(k_x x + k_z z)}}_{\text{Ebene Welle}} u(y) \Rightarrow \left[\frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left(\frac{eB}{c} \right)^2 (y_0 + y)^2 \right] u(y) = \tilde{E} u(y)$$

$$\text{mit } \tilde{E} = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, \quad y_0 = \frac{\hbar k_x}{eB}$$

Dies entspricht einem harmonischen Oszillator mit Kreisfrequenz $\omega = \frac{eB}{mc} = \omega_L$, die gerade der Lamor-Frequenz entspricht. Insgesamt erhält man somit:

$$E = \hbar\omega_L \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Man erkennt leicht, dass es zu einer großen Entartung kommt, da die Energie nicht von k_x und k_y abhängt.

Landau-Niveaus mit Spin

Jetzt zusätzlicher Spin-Anteil im Hamiltonian $H_s = \mu_B \vec{B} \vec{\sigma}$:

$$E = \hbar\omega_L \left(n + m_s + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

Es fallen immer zwei Spins zusammen ($n-1$ mit $m_s = 1/2$ und n mit $m_s = -1/2$), sodass die Entartung im Vergleich zum Fall ohne Spins verdoppelt wurde.

3.7 Magnetische Monopole

Magnetische Monopole (magn. Ladung e_m) würde sofort Quantisierung der elektrischen Ladung bedingen:

$$2e \cdot e_m = n\hbar c \quad ; \quad n \in \mathbb{Z}$$

3.8 Der Aharonov-Bohm-Effekt

Magnetfeld-Spule hinter einem Doppelspalt, Phasendifferenz zwischen Strahlen der Spalte:

$$\Delta\phi = \frac{e}{\hbar c} \Phi \quad \text{mit Fluss durch Spule } \Phi$$

Ein anliegendes Magnetfeld führt also zu einer Phasendifferenz zwischen den interferierenden Strahlen.

4 Bilder in der Quantenmechanik

Schrödinger-Bild

Die bisher verwendete Notation. Operatoren sind nicht implizit zeitabhängig (möglicherweise aber explizit). Die Wellenfunktion trägt die ganze Zeitinformation (zur Zeitentwicklung).

Zeitentwicklungsoperator

Bringt einen Zustand von der Zeit t_0 zur Zeit t :

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i\hat{H} \cdot (t - t_0)}{\hbar}\right) \quad ; \quad \hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger \quad (\text{Unitärer Operator})$$

Unitäre Operatoren erhalten die Norm, d.h. $\langle \phi | \psi \rangle = \langle U\phi | U\psi \rangle$.

4.1 Heisenberg-Bild

Mit dem Zeitoperator lässt sich das Schrödinger-Bild umschreiben:

$$\langle \psi(t) | O | \phi(t) \rangle = \langle \psi(0) | U^\dagger(t, 0) O U(t, 0) | \phi(0) \rangle = \langle \psi | O_H(t) | \phi \rangle$$

Hierbei bezeichnet $O_H(t)$ den jetzt implizit zeitabhängigen Operator im Heisenberg-Bild:

$$O_H(t) = e^{itH/\hbar} \cdot O \cdot e^{-itH/\hbar}$$

Es gilt (da H mit den exp-Fkt. des Zeitoperators (H im Exponent) kommutiert):

$$[O_H(t), H] = e^{itH/\hbar} [O, H] e^{-itH/\hbar} = [O, H]_H$$

Heisenbergsche Bewegungsgleichung

$$i\hbar \frac{dO_H(t)}{dt} = [O_H(t), H] + i\hbar \frac{\partial O_H(t)}{\partial t} \quad \text{mit} \quad \frac{\partial O_H(t)}{\partial t} := \left(\frac{\partial O}{\partial t}\right)_H = e^{itH/\hbar} \frac{\partial O}{\partial t} e^{-itH/\hbar}$$

Also sind alle nicht explizit zeitabhängigen Variablen (d.h. die partielle Zeitableitung verschwindet), die mit dem Hamiltonian kommutieren, Erhaltungsgrößen.

Spin im Magnetfeld

$$H = -\gamma B S_z \quad ; \quad \frac{d}{dt} S_H^z(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \left\langle \frac{dS_H^z(t)}{dt} \right\rangle = 0 \quad \text{da} \quad [S_H^z(t), H] = [S_z, H]_H = 0$$

Der Erwartungswert des Spins in z -Richtung ist also konstant (für $\vec{B} = B\vec{e}_z$). Bew.glg. liefert:

$$i\hbar \frac{dS_H^x(t)}{dt} = [S_H^x(t), H] = i\hbar\gamma B S_H^y(t) \quad ; \quad i\hbar \frac{dS_H^y(t)}{dt} = -i\hbar\gamma B S_H^x(t)$$

Als Lösung dieser gekoppelten Differentialgleichungen erhält man:

$$S_H^x(t) = S_x \cos(\omega_L t) + S_y \sin(\omega_L t) \quad ; \quad S_H^y(t) = S_y \cos(\omega_L t) - S_x \sin(\omega_L t) \quad \text{mit Frequenz } \omega_L = \gamma B$$

Wie im Schrödinger-Bild erhält man auch hier eine Rotation des Spins um die z -Achse mit der Larmor-Frequenz ω_L .

4.2 Dirac-Bild (Wechselwirkungsbild)

$$H = H_0 + V(t)$$

Operatoren werden nur durch den zeitunabhängigen „Standard“-Hamiltonian zeittransformiert:

$$O_I(t) := e^{iH_0 t/\hbar} O e^{-iH_0 t/\hbar}$$

Die Wellengleichung transformiert man entsprechend (mit ψ Lösung der Schrödinger-Gleichung):

$$\psi_I(t) := e^{iH_0 t/\hbar} \psi(t)$$

Dann erhält man für die Dynamik der Zustände und die der Operatoren:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_I(t) = V_I(t) \cdot \psi_I(t) \quad ; \quad i\hbar \frac{dO_I}{dt} = [O_I, H_0] + i\hbar \frac{\partial O_I}{\partial t}$$

4.3 Teilchen im Zentralfeld

Zentralfeld bedeutet $V(\vec{r}) = V(|\vec{r}|) = V(r)$.

Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) = \frac{1}{2m} (p_r^2 + \frac{\vec{L}^2}{r^2}) + V(r)$$

Da $[H, \vec{L}] = 0$ kann man davon ausgehen, dass der Hamiltonian entkoppelt, und man als Ansatz $\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ wählen kann. Hiermit lässt sich die Schrödinger-Gleichung reduzieren auf:

$$\left(\frac{p_r^2}{2m} + V_{\text{eff}}(r) \right) R(r) = ER(r) \quad \text{mit effektivem Potential } V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

und Radial-Impuls-Operator $p_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r$ in 3 Dimensionen.

Wasserstoff-Problem

$$V(r) \stackrel{\text{Gauß}}{=} -\frac{e^2}{r}$$

Zur Lösung wähle $u(r) = rR(r)$ und definiere:

- inverse Länge κ , die die Energie festlegt: $E = -\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^2$
- dimensionslose Länge $x = 2\kappa r$
- Bohrscher Radius $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0,529 \text{ \AA}$
- Rydberg-Energie $R_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = 1 \text{ Ry} \approx 13,6 \text{ eV}$
- dimensionsloses Maß für die Energie $n^2 = -\frac{R_0}{E}$

Damit vereinfacht sich die Schrödinger-Gleichung weiter:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} u + \left(\frac{n}{x} - \frac{1}{4} \right) u = 0$$

Für große x gilt:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} \approx \frac{1}{4} u \quad \Rightarrow \quad u \propto e^{-x/2}$$

Für $l \neq 0$ und kleine x erhält man entsprechend:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} \approx \frac{l(l+1)}{x^2} u \Rightarrow u \propto x^{l+1}$$

Als Ansatz wählen wir deshalb (mit Polynom $F(x) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j x^j$):

$$u(x) = x^{l+1} e^{-x/2} F(x)$$

Einsetzen und Umformen liefert für die Koeffizienten:

$$C_{j+1} = \frac{j - (n - l - 1)}{(j + 1)(j + 2(l + 1))} C_j$$

Analog zum harmonischen Oszillator soll auch diese Polynom irgendwann abbrechen, damit die Lösung normierbar bleibt, woraus wir die Abbruchbedingung erhalten:

$$\exists j \in \mathbb{N}_0 : j = n - l - 1 \Rightarrow n \in \mathbb{N} \quad \text{und} \quad n > l$$

Als Lösung erhält man somit:

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \text{mit Quantenzahlen } n \in \mathbb{N}, \quad 0 \leq l < n, \quad -l \leq m \leq l$$

mit Kugelflächenfunktionen Y_{lm} (siehe unter Drehimpulsoperator) und Radialteil:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n \cdot (n+l)!}} \cdot \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) \left(\frac{2r}{na_0}\right)^2 L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

wobei die zugeordneten Laguerre-Polynome definiert sind als:

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} L_{n+k}(x) \quad \text{mit Laguerre-Polynomen } L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x})$$

Da die Eigenenergien nur von n abhängen, sind sie (ohne Berücksichtigung von Spin) n^2 -fach entartet:

$$E_n = -\frac{R_0}{n^2}$$

5 Störungstheorie

$$H = H_0 + V$$

mit ungestörtem Hamiltonian H_0 , dessen Lösung der SG wir bereits kennen: $H_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$.

Wenn die exakte Lösung mit H nicht möglich ist, kann man versuchen, kleine Störungen ($\lambda \ll 1$) von $H = H_0 + \lambda V$ durch Entwicklung in λ zu lösen:

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad ; \quad \psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \dots$$

Durch Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung erhält man damit Gleichungen zur Bestimmung dieser Korrekturen in verschiedenen Ordnungen von λ :

$$\begin{aligned} \text{Erste Ordnung: } & H_0 \psi_n^{(1)} + V \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} \\ \text{Zweite Ordnung: } & H_0 \psi_n^{(2)} + V \psi_n^{(1)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(2)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^{(2)} \psi_n^{(0)} \\ & \dots \end{aligned}$$

Letztlich wird in der Lösung wieder das eigentliche Problem ($\lambda = 1$) betrachtet. Dies muss jedoch nicht immer funktionieren, z.B. wenn die Störung dann schon explodiert.

5.1 Nicht entartete Störungstheorie

Wenn es keine zwei Zustände von $H_n^{(0)}$ mit gleicher Eigenenergie $E_n^{(0)}$ gibt, gilt für die erste Ordnung:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle ; \quad \psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}$$

und für die zweite Ordnung entsprechend:

$$E_n^{(2)} = \langle \psi_n^{(0)} | V | \psi_n^{(1)} \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$\psi_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)} \langle \psi_m^{(0)} | \psi_n^{(1)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)} + d_{nn} \psi_n^{(0)}$$

wobei d_{nn} durch die Normierung von $\psi_n^{(2)}$ bestimmt wird.

Beispiel: Anharmonischer Oszillator

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 ; \quad V = \gamma x^3$$

Da x^3 eine ungerade Funktion, $|\psi_n|^2$ jedoch gerade, folgt sofort (Integration über ganz x):

$$E_n^{(1)} = \gamma \langle n | x^3 | n \rangle = 0$$

Wie man nachrechnen kann (mit x dargestellt durch Auf- und Absteigeoperatoren) gilt:

$$\langle m | x^3 | n \rangle = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} \left[\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} \delta_{m,n+3} + \sqrt{n(n-1)(n-2)} \delta_{m,n-3} \right. \\ \left. + 3(n+1)^{3/2} \delta_{m,n+1} + 3n^{3/2} \delta_{m,n-1} \right]$$

Für den Grundzustand $n = 0$ sind die einzigen Beiträge (wegen den Delta-Funktionen):

$$\langle 1 | V | 0 \rangle = 3\gamma \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2} ; \quad \langle 3 | V | 0 \rangle = \sqrt{6}\gamma \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{3/2}$$

Hiermit ergibt sich mit der dimensionslosen Größe $\Gamma = \frac{\gamma a_0^3}{\hbar\omega}$ mit $a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$:

$$E_0^{(2)} = \frac{|\langle 1 | V | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|\langle 3 | V | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_3^{(0)}} = -\frac{11}{8} \Gamma^2 \hbar\omega$$

Als Energie für den anharmonischen Oszillator folgt damit bis zur zweiten Ordnung:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \left(1 - \frac{11}{4} \Gamma^2 + \dots \right)$$

Für große γ würde E_0 gegen $-\infty$ gehen. Da dies jedoch physikalisch nicht möglich bzw. sinnvoll ist, sieht man hieran, dass die Näherung nur für kleine Störungen funktionieren kann, solange das x^3 Potential noch keine Überhand gewinnt.

5.2 Entartete Störungstheorie

Betrachten wieder die Entwicklung der Wellenfunktion nach ungestörten Eigenfunktionen:

$$\psi_n^{(1)} = \sum_l C_{nl} \psi_l^{(0)}$$

Für einen entarteten Unterraum (alle Wellenfunktionen m mit Eigenenergie $E_m^{(0)} = E_n^{(0)}$ für ein n):

$$\langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle = E_n^{(1)} \delta_{nm}$$

Können beliebige Linearkombinationen der Wellenfunktionen dieses Unterraums bilden. Wählen so, dass $\langle \psi_n^{(0)} | V | \psi_m^{(0)} \rangle$ Diagonalgestalt hat. Dann sind die $E_n^{(1)}$ gerade die Eigenwerte dieser Matrix.

Man muss also (auch ohne Diagonalisierung) lediglich die Eigenwerte von $\langle \psi_n^{(0)} | V | \psi_m^{(0)} \rangle$ berechnen.

Beispiel: Zweifach entarteter Zustand

Haben zweidimensionalen entarteten Unterraum mit $V_{ij} = \langle i | V | j \rangle$, $i = 1, 2$. Es gilt insb. $V_{12} = V_{21}^*$. Die Eigenwerte der Matrix sind:

$$E^{(1)} = \frac{1}{2} \left(V_{11} + V_{22} \pm \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2} \right)$$

Falls die Störungsmatrix bereits diagonal ist ($V_{12} = 0$) und außerdem $V_{11} = V_{22}$ gilt, so erhält man nur einen Eigenwert ($E^{(1)} = V_{11}$) und die Entartung wird nicht aufgehoben.

Beispiel: Spin im magnetischen Feld

$$H_0 = 0 \quad ; \quad H = -\gamma \vec{B} \vec{S} = -\frac{\hbar\gamma}{2} \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & -B_z \end{pmatrix} \Rightarrow \text{Eigenwerte } E = \pm \frac{\hbar\gamma}{2} |\vec{B}|$$

Für $B = 0$ existiert eine zweifache Entartung, die bei endlichem Magnetfeld aufgehoben wird.

Beispiel: Stark-Effekt

Wasserstoff im äußeren elektrischen Feld $\vec{E} = E\vec{e}_z = \text{const.}$:

$$H = H_0 + V \quad \text{mit } H_0 \text{ des Wasserstoffs und Störung } V = e\phi \stackrel{\text{Wahl}}{=} eE_z z = eE_z r \cos\theta$$

Für $n = 2$ haben wir ohne Störung eine vierfache Entartung des Wasserstoffspektrums: $E_2^{(0)} = -R_0/4$. Für die Störung müssen wir die Matrixelemente $\langle 2, l, m | V | 2, l', m' \rangle$ berechnen. Aus Symmetriegründen (räumliche Integration über eine ungerade Funktion verschwindet, Kugelflächenfunktionen sind orthogonal) verschwinden jedoch alle Beiträge bis auf:

$$\langle 2, 0, 0 | V | 2, 1, 0 \rangle = -3eE_z a_0 := -\Delta \quad \text{mit Bohrschem Radius } a_0$$

Als Eigenwerte erhält man dann:

$$E_{1,2}^{(1)} = 0 \quad ; \quad E_{3,4}^{(1)} = \pm\Delta$$

sodass die 4-fache Entartung aufgehoben wurde, die gleiche Energie jetzt nur zweifach entartet ist, und zwei Eigenenergien um $\pm\Delta$ verschoben wurden. Ein elektrisches Feld hebt also auch die Entartung auf.

5.3 Variationsprinzip

Wenn die exakten Lösungen der Schrödinger-Gleichung nicht ermittelt werden können, kann man versuchen, Wellenfunktionen $|\phi_v\rangle$ zu erraten, indem man die Energie $E_v = \langle \phi_v | H | \phi_v \rangle$ minimiert, denn:

$$E_v = \langle \phi_v | H | \phi_v \rangle \geq E_0 \quad \text{für beliebiges } \phi_v \text{ und Eigenenergie des Grundzustands } E_0$$

Man macht jetzt einen „educated guess“ und rät eine mögliche Wellenfunktion $\phi_v(\lambda_i, \vec{r})$, die durch Variationsparameter λ_i charakterisiert wird. (Bsp.: Man erwartet eine Gauß-Kurve, aber man kennt weder Mittelwert noch Standardabweichung. Dies wären in diesem Fall solche Parameter.)

Die beste mit diesem Ansatz mögliche Lösung erhält man dann durch Minimierung der Eigenenergien:

$$\min_{\lambda_i} E_v(\lambda_i) \quad \text{mit } E_v(\lambda_i) = \langle \phi_v(\lambda_i) | H | \phi_v(\lambda_i) \rangle$$

Beispiel: Harmonischer Oszillator

Ansatz:

$$\phi_v(x) = \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\lambda x^2}$$

Als Eigenenergien dieser Funktionen erhält man:

$$E_v = \langle \phi_v | H | \phi_v \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \lambda + \frac{m\omega^2}{2} \frac{1}{4\lambda}$$

Durch Ableitung null setzen erhält man damit die Bedingung für das Minimum:

$$\frac{\partial E_v}{\partial \lambda} = 0 \Rightarrow \lambda = \frac{m\omega}{2\hbar} \Rightarrow E_v = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Wir haben somit das exakte Ergebnis erhalten. Dies liegt allerdings daran, dass wir bereits die richtigen Funktionen angesetzt haben, i.A. wird eine Energie $E_v \geq E_0$ (s.o.) zu erwarten sein.**Beispiel: Doppelmuldenpotential**

$$V(x) = \frac{k}{8a_0^2} (x^2 - a_0^2)^2$$

Ansatz: Zwei harm. Oszillatoren mit diskretem Variationsparameter (das Vorzeichen):

$$\phi_v(x) = \alpha [\psi_0(x - a_0) \pm \psi_0(x + a_0)]$$

 α ist lediglich eine Normierungskonstante. Definiere noch $l_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ und $\rho = \frac{a_0}{l_0}$. Damit:

$$E_v = \langle \phi_v | H | \phi_v \rangle = \hbar\omega \pm \hbar\omega \frac{5}{4} \rho^2 e^{-\rho^2}$$

Das negative Vorzeichen ergibt die kleinere Energie: Der Grundzustand in diesem Potential liegt auf beiden Seiten und das Quantenteilchen befindet sich gleich wahrscheinlich auf beiden Seiten und die Wellenfunktionen beider Seiten sind in Antiphase. Bei $x = 0$ ergibt sich damit eine verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Dennoch können die Quantenteilchen zwischen den Seiten tunneln.

6 Pfadintegrale in der QM

Nicht klausurelevant.

7 Nützliches

Schwarzsche Ungleichung

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2$$

Relativistische Energie-Impuls-Beziehung

$$E = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2}$$

7.1 Koordinatensysteme

Kugelkoordinaten

$$x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \phi$$

$$y = r \cdot \sin \theta \cdot \sin \phi$$

$$z = r \cdot \cos \theta$$

$$dV = r^2 \sin \theta \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\phi$$

$$dA = r^2 \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\phi$$

$$d\Omega = \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\phi$$

$(\vec{e}_r, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi)$ bildet ein Rechts-System

$$\vec{\nabla} f = \vec{e}_r \frac{\partial f}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial f}{\partial \phi}$$

$$\vec{\nabla} \vec{A} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 A_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta A_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial A_\phi}{\partial \phi}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{r \sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta A_\phi) - \frac{\partial A_\theta}{\partial \phi} \right) \vec{e}_r + \frac{1}{r} \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial A_r}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial r} (r A_\phi) \right) \vec{e}_\theta + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (r A_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial \theta} \right) \vec{e}_\phi$$

Kugelflächenfunktionen

sind Eigenfunktionen von L_z, \vec{L}^2 :

$$|l, m\rangle = Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$$

mit zugeordneten Legendre-Polynomen $P_l^m(x) = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x)$

und Legendre-Polynomen $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$

Eigenschaften:

- Orthonormalität: $\langle l, m | l', m' \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$
- Einige Legendre-Polynome: $P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$
- Parität der (zugeordn.) LP.: $P_l^m(x) = (-1)^{l-m} P_l^m(-x)$ aufgrund $P_l(x) = (-1)^l P_l(-x)$
- Parität der Kugelfl.fkt.: $\hat{P} Y_{lm}(\theta, \phi) = Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi)$
- Zusammenhang zur komplex-konjugierten Kugelfl.fkt.: $Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{l,m}^*$

Entwicklung in Kugelflächenfunktionen

$$\varphi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left[A_{lm} r^l + B_{lm} r^{-(l+1)} \right] Y_{lm}(\theta, \phi)$$

mit Kugelflächenfunktionen $Y_{lm}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi}$

und zugeordneten Legendre-Polynomen $P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l$

Für Funktionen $g(\theta, \phi)$ ohne r -Abhängigkeit gilt sogar:

$$g(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \text{mit} \quad C_{lm} = \int d\Omega \cdot g(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta, \phi)$$

Zylinderkoordinaten

$$x = r \cdot \cos \phi$$

$$y = r \cdot \sin \phi$$

$$z = z$$

$$dV = r \cdot dr \cdot d\phi \cdot dz$$

$$dA = r \cdot d\phi \cdot dz$$

$(\vec{e}_r, \vec{e}_\phi, \vec{e}_z)$ bildet ein Rechts-System

$$\vec{\nabla} f = \vec{e}_r \frac{\partial f}{\partial r} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial \phi} + \vec{e}_z \frac{\partial f}{\partial z}$$

$$\vec{\nabla} \vec{A} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r A_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial A_\phi}{\partial \phi} + \frac{\partial A_z}{\partial z}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \left(\frac{1}{r} \frac{\partial A_z}{\partial \phi} - \frac{\partial A_\phi}{\partial z} \right) \vec{e}_r + \left(\frac{\partial A_r}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial r} \right) \vec{e}_\phi + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (r A_\phi) - \frac{\partial A_r}{\partial \phi} \right) \vec{e}_z$$

7.2 Eigenschaften des Skalarprodukts

$$\langle a|b \rangle = \langle b|a \rangle^* \quad ; \quad \langle \lambda a|b \rangle = \lambda^* \langle a|b \rangle \quad ; \quad \langle a|\lambda b \rangle = \lambda \langle a|b \rangle \quad ; \quad \langle a|a \rangle = \|a\|^2 \geq 0 \quad ; \quad \langle a|a \rangle = 0 \Leftrightarrow a = 0$$

$$\langle a+b|c \rangle = \langle a|c \rangle + \langle b|c \rangle \quad ; \quad \langle a|b+c \rangle = \langle a|b \rangle + \langle a|c \rangle$$

7.3 Operator-Identitäten

$$[A, B] = -[B, A] \quad ; \quad [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad ; \quad [A, f(A)] = 0$$

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} \quad ; \quad \frac{d}{d\lambda} e^{\lambda A} = A e^{\lambda A} = e^{\lambda A} A \quad ; \quad e^A e^{-A} = \mathbb{1}$$

Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

$$[A, [A, B]] = 0 = [B, [A, B]] \quad \Rightarrow \quad e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2}$$

7.4 Konstanten

$$\epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm} = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ A}^2 \text{ s}^4 \text{ kg}^{-1} \text{ m}^{-3}$$

$$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ N A}^{-2} \approx 1,257 \cdot 10^{-6} \text{ N A}^{-2}$$

$$c = 2,998 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$$

$$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$$

$$m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

$$m_p = 1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$G = 6,674 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ s}^{-2}$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ J s} = 6,582 \cdot 10^{-16} \text{ eV s}$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5,788 \cdot 10^{-5} \text{ eV T}^{-1}$$