

Inhaltsverzeichnis

0	Quantenmechanik	2
0.1	Mechanik	2
0.2	Quantenmechanik	2
0.3	Schrödinger- und Heisenbergbild	4
0.4	Harmonischer Oszillator	5
1	Zeitabhängige Störung	6
1.1	Zeitabhängige Störungstheorie und das Wechselwirkungsbild	6

0 Quantenmechanik

0.1 Mechanik

Der einfachste Lagrange lautet

$$L(x, \dot{x}) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x)$$

Um jetzt die Hamiltonfunktion zu konstruieren, schreiben wir:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} (= m\dot{x})$$

Sodass

$$H(x, p) = p\dot{x} - L(x, \dot{x}) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

Poisson-Klammern:

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial p} \quad (0.1)$$

Beispiele mit Spezialfällen:

$$\frac{dF}{dt} = \dot{F} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} \quad \text{Phasenraumfunktion } F(x, p, t)$$

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \quad \text{Falls } H \text{ nicht explizit zeitabhängig, dann ist Energie in } H \text{ erhalten.}$$

$$\frac{dx}{dt} = \{x, H\} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \rightarrow \text{Geschwindigkeit ist Impuls durch Masse.}$$

$$\frac{dp}{dt} = \{p, H\} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad \text{Newton: } F = ma = \dot{p} = -\nabla V$$

Fundamentale Poissonklammern:

$$\begin{aligned} \{x, x\} &= \{p, p\} = 0 \\ \{x, p\} &= 1 \end{aligned} \quad (0.2)$$

0.2 Quantenmechanik

\hat{A} ist Operator. Und e hoch eine Matrix ist definiert als:

$$e^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^n}{n!}$$

Der Operator \hat{p} erzeugt Translationen

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\hbar} a \hat{p}} \psi(x) &= \psi(x + a) \\ &= e^{a \frac{\partial}{\partial x}} \psi(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \psi(x) \\ &\stackrel{\text{Taylorreihe}}{=} \sum_n \frac{a^n}{n!} \psi^{(n)}(x) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\begin{aligned} (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi(x) &= \\ &= [\hat{x}, \hat{p}]\psi(x) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial x} \psi - \frac{\partial}{\partial x} x \psi \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} (x\psi' - \psi - x\psi') \\ &= i\hbar\psi(x) \text{ für alle } \psi(x) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar} \quad \text{Born-Jordan Relation}$$

Beschränkte Operatoren wirken auf Zustände im Hilbertraum $L_2(\mathbb{C}) = H$:

$$\hat{A} |n\rangle = a_n |n\rangle$$

Wobei a_n Eigenwerte sind und $|n\rangle$ Eigenzustände¹ $\in H$. Da $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ selbstadjungiert ist, $\Rightarrow a_n \in \mathbb{R}$ und es gilt $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ (normiert) "Strahl in H".

Es gilt die Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$$

bzw. $\{|a_n\rangle\}$ ist Basis von H , falls \hat{A} ein rein diskretes Spektrum $\{a_n\}$ hat.

Allgemeiner: Das Gelfand Tripel:

$$\{\Phi, H, \Phi'\} \text{ mit } \Phi \subset H \subset \Phi'$$

Dann ist $|a_n\rangle \in \Phi \Rightarrow \langle a_n|a_n\rangle = 1$ normierbar.

Sind alle $|a_n\rangle \in \Phi$ dann gilt $\Phi = H = \Phi'$ und \hat{A} hat ein rein diskretes Spektrum. Aber es gibt auch uneigentliche Eigenvektoren

$$|x\rangle, |p\rangle \in \Phi'$$

dies ist eine uneigentliche Basis von H , aber $|x\rangle \notin H$

$$\begin{aligned} \hat{x} |x\rangle &= x |x\rangle, & \langle x|x'\rangle &= \delta(x - x'), & \int dx |x\rangle \langle x| &= \mathbb{1} \\ \hat{p} |p\rangle &= p |p\rangle, & \langle p|p'\rangle &= 2\pi\delta(x - x'), & \int \frac{dp}{2\pi} |p\rangle \langle p| &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

Wenn wir eine Fourier Transformation machen, fügt man im Endeffekt einfach eine $\mathbb{1}$ ein:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \langle x| \int \frac{dp}{2\pi} |p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi} \langle x|p\rangle \langle p|\psi\rangle = \int \frac{dp}{2\pi} e^{-ipx} \tilde{\psi}(p)$$

¹In der Vorlesung wurde $|a_n\rangle$ benutzt.

Der Hamiltonoperator erzeugt zeitliche Translationen:

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{U}}_t |\psi(0)\rangle$$

$$\text{mit } \mathcal{U}_t = \text{T exp} \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t \right)$$

Wobei T ein Zeitoperator² ist und $\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p})$ aber $[\hat{x}, \hat{p}] \neq 0$. Allgemein gilt $e^A e^B \neq e^{A+B}$ wenn $[A, B] \neq 0$.

$\hat{\mathcal{U}}_t$ ist unitär:

$$\hat{\mathcal{U}}_t + \hat{\mathcal{U}}_t^\dagger = \hat{\mathcal{U}}_{-t} \hat{\mathcal{U}}_t = \mathbb{1}. \quad (0.3)$$

Mögliche Messergebnisse von A zur Zeit t : a_n Erwartungswert:

$$\langle A \rangle_\psi(t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \sum_n \langle \psi(t) | \hat{A} | n \rangle \langle n | \psi(t) \rangle = \sum_n a_n \underbrace{|\langle \psi(t) | n \rangle|^2}_{|c_n(t)|^2}$$

Dabei ist $|c_n(x)|^2$ die Wahrscheinlichkeit den Zustand $|n\rangle$ anzutreffen.

$$\begin{aligned} c_n(t) &= \\ &= \langle \psi(t) | n \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \hat{\mathcal{U}}_t^\dagger | n \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \text{T} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | n \rangle \\ &= \sum_m \langle \psi(0) | m \rangle \langle m | n \rangle e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} \\ &= \sum_m \langle \psi(0) | m \rangle \langle m | n \rangle e^{\frac{i}{\hbar} E_m t} \end{aligned}$$

So kann man auch schreiben:

$$\langle A \rangle_\psi(t) = \sum_{n,m,k} a_n e^{\frac{i}{\hbar} (E_m - E_k) t} \langle \psi(0) | m \rangle \langle k | \psi(0) \rangle \langle m | n \rangle \langle n | k \rangle$$

Falls $[\hat{H}, \hat{A}] = 0$, dann existiert simultanes System von Eigenzuständen $\rightsquigarrow \langle m | n \rangle = \delta_{mn}$ (für nicht-entarteten Fall).

0.3 Schrödinger- und Heisenbergbild

Schrödinger Bild:

zeitunabhängige Operatoren \hat{A}

zeitabhängige Zustände $|\psi(t)\rangle$

Damit

Heisenberg Bild:

zeitabhängige Operatoren $\hat{A}_H(t)$

zeitunabhängige Zustände $|\psi\rangle_H$

$$\begin{aligned} \langle \psi'(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle &\equiv {}_H \langle \psi' | \hat{A}_H(t) | \psi \rangle_H \\ &\Rightarrow \hat{A}_H(t) = \hat{\mathcal{U}}_t^\dagger \hat{A} \hat{\mathcal{U}}_t, \quad |\psi\rangle_H = |\psi(0)\rangle \end{aligned}$$

²Hier hat Prof. Bali kurz erklärt, wie T auf die Exponentialfunktion wirkt, aber ich konnte es bis jetzt nicht verstehen.

Energie Eigenzustände:

$$\begin{aligned}\hat{H} |n\rangle &= E_n |n\rangle \Rightarrow H |n(t)\rangle = E_n |n(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle \\ |n(t)\rangle &= |n(0)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} = |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}\end{aligned}$$

$\Rightarrow |n\rangle = |n\rangle_H$ für “stationäre” Zustände.

Ehrenfesttheorem:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_\psi &= i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \\ &= i\hbar \left(\langle \dot{\psi} | \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} | \dot{\psi} \rangle + \langle \psi | \dot{\hat{A}} | \psi \rangle \right) \\ &= \left(\langle \psi | -\hat{H} \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H} \hat{A} | \psi \rangle + i\hbar \frac{\partial \langle \hat{A} \rangle}{\partial t} \right) \\ &= \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_\psi + i\hbar \frac{\partial \langle \hat{A} \rangle}{\partial t} \\ &\Rightarrow \boxed{\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_\psi = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{A} \rangle}\end{aligned}$$

Beispiel:

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \hat{p}, \text{ mit } \hat{p} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x} \text{ und } \hat{V} = V(x) \\ \frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{V}] \rangle = -\left\langle \frac{\partial \hat{V}}{\partial x} \right\rangle\end{aligned}$$

Heisenberggleichung:

$$\boxed{\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t}} \quad (0.4)$$

ist äquivalent zur Schrödingergleichung:

$$\boxed{\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle} \quad (0.5)$$

0.4 Harmonischer Oszillator

$$\begin{aligned}H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2} \omega^2 x^2 & y &:= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \\ \Rightarrow H &= \hbar \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} y^2 \right) = \hbar \omega \tilde{H} & \text{mit } \tilde{H} &= \frac{1}{2} (\tilde{p}^2 + y^2) \\ \Rightarrow [y, \tilde{p}] &= i & \text{wobei } \tilde{p} &= -i \frac{\partial}{\partial y}\end{aligned}$$

wobei

$$\text{Vernichtungsoperator: } a = \frac{1}{\sqrt{2}} (y + i\tilde{p})$$

$$\text{Erzeugungsoperator: } a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (y - i\tilde{p})$$

Und da dann

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= 1 & \text{oder } aa^\dagger &= a^\dagger a + 1 \\ \Rightarrow \tilde{H} &= \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \\ \text{und somit } y &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a + a^\dagger), & \tilde{p} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a - a^\dagger) \end{aligned}$$

Sei nun:

$$\tilde{H} |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle \quad (H |n\rangle = E_n |n\rangle \Rightarrow E_n = \hbar\omega\epsilon_n) \quad a^\dagger a |n\rangle = \left(\epsilon_n - \frac{1}{2} \right) |n\rangle$$

(n ist Anzahl der Knoten (Nullstellen) der Wellenfunktionen.) Aus QM 1:

$$\begin{aligned} a |n\rangle &= \sqrt{n} |n-1\rangle \\ a^\dagger |n\rangle &= \sqrt{n+1} |n+1\rangle \\ \Rightarrow \epsilon_{n+1} &= \epsilon_n + 1 \end{aligned}$$

mit $n = 0, 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned} \epsilon_n &= n + \frac{1}{2} \rightsquigarrow E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \\ \text{und } \underbrace{a^\dagger a}_N |n\rangle &= n |n\rangle \end{aligned}$$

Somit ist $\tilde{H} = N + \frac{1}{2}$.

1 Zeitabhängige Störung

1.1 Zeitabhängige Störungstheorie und das Wechselwirkungsbild

Betrachte

$$H(t) = H^0 + H^1(t)$$

H^0 ist zeitunabhängig: $H^1(t) = 0$ für $t < t_i$ oder $t > t_f$ Ungestörtes System:

$$\begin{aligned} H^0 |n\rangle &= E_n |n\rangle = \hbar\omega_n |n\rangle \\ |\psi(t)\rangle &= \sum_n \langle n | \psi(t_0) \rangle e^{-i\omega_n(t-t_0)} |n\rangle \quad \text{für } t, t_0 < t_i \text{ (oder } t, t_0 > t_f) \end{aligned}$$

Von nun an: $|\psi(t_0)\rangle = |n\rangle$ für $t_0 < t_i$

$$\Rightarrow \boxed{|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega_n(t-t_0)} |n\rangle} \text{ für } t_0, t < t_i$$

Formale Lösung von

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H^0 |\psi(t)\rangle$$

Ist

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = T e^{-\frac{i}{\hbar} H^0(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle = \mathcal{U}^0(t-t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

Achtung: T ist Zeit**ordnungs**operator und $\mathcal{U}^0(t-t_0)$ ist Zeit**entwicklungs**operator.
Eigenschaften:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{U}^0(t_1)\mathcal{U}^0(t_2) &= \mathcal{U}^0(t_1+t_2) \\ \mathcal{U}^0(-t) &= \mathcal{U}^{0\dagger}(t) \end{aligned} \right\} \mathcal{U}^{0\dagger}(t)\mathcal{U}^0(t) = \mathbb{1}$$

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \mathcal{U}^{0\dagger}(t-t_0) \mathcal{U}^0(t-t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ &= \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \end{aligned}$$

Norm bleibt erhalten $\Rightarrow U^0$ ist unitär!

Betrachte nun

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

Endzustand ($t > t_f$):

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_m c_m(t) e^{-i\omega_m(t-t_0)} |m\rangle}$$

Übergangswahrscheinlichkeit von $|n\rangle$ in den Zustand $|m\rangle$:

$$\boxed{P_{mn}(t) = |c_m(t)|^2}$$

Das gestörte System

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (H^0 + H^1(t)) |\psi(t)\rangle$$

wird im Allgemeinen nicht durch

$$|\psi(t)\rangle = T e^{-\frac{i}{\hbar} H(t)(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle$$

gestört! $H(t)$ ist zeitabhängig. Aber

$$\begin{aligned} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle &= \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \\ \Rightarrow |\psi(t)\rangle &= \mathcal{U}(t-t_0) |\psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

$\mathcal{U}(t, t_0)$ ist ein noch unbekannter unitärer Zeitentwicklungsoperator.
 $|\psi(t)\rangle$ ist Wellenfunktion im Schrödingerbild.

Betrachte: