Inhaltsverzeichnis

0	Quantenmechanik		
	0.1	Mechanik	2
	0.2	Quantenmechanik	2
	0.3	Schrödinger- und Heisenbergbild	4
	0.4	Harmonischer Oszillator	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:

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial x} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial B}{\partial x} \frac{\partial A}{\partial p} \tag{0.1}$$

Beispiele mit Spezialfällen:

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} = \dot{F} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}$$

Phasenraumfunktion F(x, p, t)

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \{H,H\} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

Falls H nicht explizit zeitabhängig, dann ist Energie in H erhalten.

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \{x, H\} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

 $=\frac{p}{m} \to \operatorname{Geschwindigkeit}$ ist Impuls durch Masse.

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = \{p, H\} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

Newton: $F = ma = \dot{p} = " - \nabla V"$

Fundamentale Poissonklammern:

$$\{x, x\} = \{p, p\} = 0$$

$$\{x, p\} = 1$$

$$(0.2)$$

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

$$e^{\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}\psi(x) = \psi(x+a)$$

$$= e^{a\frac{\partial}{\partial x}}\psi(x)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \psi(x)$$

$$\stackrel{Taylorreihe}{=} \sum_n \frac{a^n}{n!} \psi^{(n)}(x)$$

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

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

$$\Rightarrow [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$
 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 $\langle a_m | a_n \rangle = \delta_{mn}$ (normiert) "Strahl in H".

Es gilt die Vollständigkeitsrelation:

$$\sum_{n} |a_n\rangle \langle a_n| = 1$$

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

$$\{\Phi, H, \Phi'\}$$
 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 $|x\rangle \notin H$

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle , \qquad \langle x|x'\rangle = \delta(x - x') , \qquad \int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}$$

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

Wenn wir eine Fourier Transformation machen, fügt man im Endeffekt einfach eine 1 ein:

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

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

Der Hamiltonoperator erzeugt zeitliche Translationen:

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = \hat{U}_t |\psi(0)\rangle$$
mit $U_{\hat{t}} = \text{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)$

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{U}_t ist unitär:

$$\hat{U}_t + \hat{U}_t = \hat{U}_{-t}\hat{U}_t = 1. \tag{0.3}$$

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.

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

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: Heisenberg Bild: zeitunabhängige Operatoren \hat{A} zeitabhängige Operatoren $\hat{A}_H(t)$ zeitabhängige Zustände $|\psi(t)\rangle$ zeitunabhängige Zustände $|\psi\rangle_H$ Damit

$$\langle \psi'(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle \equiv {}_{H}\langle \psi'|\hat{A}_{H}(t)|\psi\rangle_{H}$$

$$\Rightarrow \hat{A}_{H}(t) = \hat{U}_{t}^{\dagger}\hat{A}\hat{U}_{t} , |\psi\rangle_{H} = |\psi(0)\rangle$$

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

Energie Eigenzustände:

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

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

Ehrenfesttheorem:

$$\begin{split} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle_{\psi} &= \\ &= i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle\psi(t)\left|\hat{A}\right|\psi(t)\right\rangle \\ &= i\hbar\left(\left\langle\dot{\psi}\left|\hat{A}\right|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\left|\hat{A}\right|\dot{\psi}\right\rangle + \left\langle\psi\left|\dot{\hat{A}}\right|\psi\right\rangle\right) \\ &= \left(\left\langle\psi\left|-\hat{H}\hat{A}\right|\psi\right\rangle + \left\langle\psi\left|\hat{H}\hat{A}\right|\psi\right\rangle + i\hbar\frac{\partial\langle\hat{A}\rangle}{\partial t}\right) \\ &= \left\langle\left[\hat{A},\hat{H}\right]\right\rangle_{\psi} + i\hbar\frac{\partial\langle\hat{A}\rangle}{\partial t} \\ &\Rightarrow \boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle_{\psi} = -\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle + \frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{A}\rangle}{(0.4)} \end{split}$$

Beispiel:

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

Heisenberggleichung:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}_{H}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{A}_{H}, \hat{H} \right] + \frac{\partial \hat{A}_{H}}{\partial t}$$
 (0.5)

ist äquivalent zur Schrödingergleichung:

$$\frac{\mathrm{d} |\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} |\psi(t)\rangle$$
 (0.6)

0.4 Harmonischer Oszillator

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