Inhaltsverzeichnis

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:

$\frac{\mathrm{d}F}{dt} = \dot{F} = \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t}$	Phasenraumfunktion $F(x, p, t)$
$\frac{\mathrm{d}H}{dt} = \{H, H\} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$	Falls H nicht explizit zeitabhängig, dann ist Energie in H erhalten.
$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \{x, H\} = \frac{\partial H}{\partial p}$	$= \frac{p}{m} \rightarrow$ 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:

$$\begin{aligned} \{x, x\} &= \{p, p\} = 0 \\ \{x, p\} &= 1 \end{aligned} \tag{0.2}$$

0.2 Quantenmechanik

Â 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

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

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

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

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

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

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

Wobei a_n Eigenwerte sind und $|n\rangle$ Eigenzustände[1] $\in H$. 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:

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

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 <u>uneigentliche</u> Eigenvektoren

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

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

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

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

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

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

Der Hamiltonoperator erzeugt zeitliche Translationen:

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

Wobei T ein Zeitoperator[2] 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:

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

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.

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

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

Damit

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

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

Energie Eigenzustände:

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

$\Rightarrow \left|n\right\rangle = \left|n\right\rangle_H$ für "stationäre "Zustände.
Ehrenfesttheorem:

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

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle_\psi = -\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle + \frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{A}\rangle} \tag{0.4}$$

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:

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

ist äquivalent zur Schrödingergleichung:

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

0.4 Harmonischer Oszillator

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2 \qquad\qquad y := \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

$$\Rightarrow H = \hbar\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}y^2\right) = \hbar\omega\tilde{H} \qquad\qquad \text{mit } \tilde{H} = \frac{1}{2}\left(\tilde{p}^2 + y^2\right)$$

$$\Rightarrow [y, \tilde{p}] = i \qquad\qquad \text{wobei } \tilde{p} = -i\frac{\partial}{\partial y}$$