Wichtige Formeln für die Quantenmechanik

Christoph Würstle

7. Dezember 2003

1 Mathematik

1.1 Fouriertransformation

$$F(w) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iwt} f(t) dt \tag{1}$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iwt} F(w) dw \tag{2}$$

1.2 Deltafunktion

$$\delta(k - k') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx$$

2 Schrödingergleichung

2.1 Schrödingergleichung

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A e^{[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{pr} - Et)]}$$

2.2 Freie Schrödingergleichung

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{k} a(\mathbf{k}) e^{i[\mathbf{kr} - w(k)t}$$

und Dispersion $w(\mathbf{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m}$

2.3 Rezept

Mit

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\frac{\hbar}{i} grad)^2 + V(r)$$

folgt:

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

2.4 Eigenschaften:

- Linear
- als Anfangswertproblem lösbar
- Normierbar

3 Kontinuitätsgleichung, Mittelwerte

3.1 Kontinuitätsgleichung

ψ ist quadratintegrabel und folglich normierbar: $\int d^3\mathbf{r}|\psi|^2 = 1$
Die Normierung bleibt für alle Zeiten erhalten erhalten, d.h es lässt sich eine Kontinuitätsgleichung formulieren:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0$$

3.2 Mittelwerte des Ortes und Impulses

$$< \mathbf{r} >= \int \mathbf{r}\varphi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r} = \int \psi^* r\psi d^3r$$
$$< \mathbf{p} >= \int \psi^* \frac{\hbar}{i}\nabla\psi d^3\mathbf{r}$$

Es ergeben sich folgende Relation:

$$\frac{d}{dt} < \mathbf{r} >= \frac{1}{m} < \mathbf{p} >$$
$$m\frac{d^2}{dt^2} < \mathbf{r} >= - < gradV >$$

Laut Theorem von Ehrenfest gilt:
Die Mittelwerte quantenmechanischer Größen bewegen sich nach den klassischen Gleichungen.

4 Stationäre Zustände, Operatoren

4.1 Stationäre Zustände

Betrachte den Fall, dass $\hat{H}$ zeitunabhängig ist!
Lösung der SG durch Seperationsansatz:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \tag{3}$$
$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{4}$$

Mit $E = -\hbar\alpha$.Die Zustände (4) heißen Stationäre Zustände.

4.2 Eigenwert der Energie

Mit $< \hat{H} >= E$ folgt:

$$< \hat{H} > \psi = E\psi$$

Energiespektrum von $\hat{H}$ kann diskret als auch kontinuierlich sein!

4.3 Skalarprodukt

Das Skalarprodukt existiert für quadratintegrable Funktionen:

$$< f|g >= \int d^3\mathbf{r} f^*(\mathbf{r}) g(\mathbf{r})$$

und hat die bekannten Eigenschaften eines Skalarprodukts.

4.4 Hilbertraum

Ein unendlichdimensionaler Vektorraum über dem Grundkörper der komplexen Zahlen, indem ein Skalarprodukt definiert ist, dass jedem Funktionenpaar f, g einer Funktionenmenge eine komplexe Zahl zuordnet.

Die Wellenfunktionen eines qm. Systems bilden einen Hilbertraum.

4.5 Adjungierter Operator

Mit dem zu A adjungierten Operator A^+ gilt:

$$< f|\hat{A}g >=< f\hat{A}^+|g >$$

4.6 Selbstadjungierter (=hermitescher) Operator

$$\hat{A} = \hat{A}^+$$

Beispiele, Eigenschaften (für hermitesche Operatoren):

- pot. Energie
- Impulsoperator
- A hermitesch $\Rightarrow A^n$ hermitesch
- A, B hermitesch $\Rightarrow A + B$ hermitesch
- Der Mittelwert eines hermiteschen Körpers $\hat{A}$ ist reell.
- Die Obervablen (Meßgrößen) der klass. Mechanik werden in der QM zu hermiteschen Operatoren.

4.7 Eigenwertgleichung

$$\hat{A}\psi = \alpha\psi$$

bzw.

$$\underbrace{\hat{A}}_{Eigenfunktion} \quad \psi_n = \underbrace{\alpha}_{Eigenwert} \quad \psi_n$$

mit Normierung und der Tatsache, dass die Eigenwerte hermitescher Operatoren reell sind folgt:

$$0 = (\alpha_n - \alpha_m) < \psi_m|\psi_n >$$

$\Rightarrow$ Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigenwerten von hermiteschen Operatoren sind othogonal.

5 Teilchen in einer 1-dim Box

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

Mit RB, $\psi(0) = 0 = \psi(a)$ und $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ folgt:

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$$

bzw. mit eingesetzten RB folgt:

$$\psi(x) = sin(kx)$$

mit Normierung

$$1 = c^2\int_0^a dx sin^2(kx) = c^2\frac{1}{k}\int_0^{ka=n\pi} d\varphi sin^2(\varphi) = \frac{c^2 a}{2}$$

ergibt sich die Eigenfunktion:

$$\psi_n(x) = \underbrace{\sqrt{\frac{2}{a}}}_{Normierung} sin(k_n x)$$

bzw. für die Eigenwerte:

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}k_n^2$$

Für stehende Wellen folgt Stromdichte $j_n = 0$, d.h keine Wahrscheinlichkeit verlässt die Box (?).

$$\psi_1 \equiv Grundzustand$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\pi}{2})^2 > 0(\equiv Gundzustandsenergie)$$

Mittelwert Impuls:

$$< \hat{p}_x >= \int_0^a \frac{\hbar}{i}\psi^*(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)dx = 0$$

Verschiebung des Koordinatenursprungs nach $\frac{a}{2}$:

$$x = \frac{a}{2} + \zeta$$

$$\rightarrow sin(k_n x) = sin(k_n\zeta + n\frac{\pi}{2})$$

Folglich:

$$\psi_n(\zeta) = \sqrt{\frac{2}{a}}\{ \begin{array}{ll} cos(k_n\zeta) & n = 1, 3, 5, \cdots \\ sin(k_n\zeta) & n = 2, 4, 5, \cdots \end{array}$$

Eigenwerte der Energie: $E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2$ mit $n \equiv$Quantenzahl

6 Der lineare harm. Oszillator

Klassische Gleichung:

$$H(p,x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}mw^2x^2$$

Stationäre SG:

$$\underbrace{-\hbar^2 \frac{d^2\varphi}{dx^2}}_{p^2} \frac{1}{2m} + \frac{m}{2}w^2x^2\varphi(x) = E\psi(x)$$

Ziel: normierbare Eigenfunktion und Eigenwerte
Nach Division durch $\hbar w$ wird mit $\alpha^2 = \frac{mw}{\hbar}$

$$\frac{1}{2}(\alpha^2x^2 - \frac{1}{\alpha^2}\frac{d^2}{dx^2})\varphi(x) = \frac{E}{\hbar w}\varphi(x)$$

Def. der Operatoren b und b^+

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha x + \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx}) \tag{5}$$

$$b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha x - \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx}) \tag{6}$$

6.1 Kommutator

Definition:

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

Wichtiges Beispiel:

$$[p_x x - x p_x] = \frac{\hbar}{i}$$

6.2 Folgen für harm. Oszillator

Es gilt:

$$bb^+ - b^+b = \hat{1}$$

SG wird zu:

$$(b^+b + \frac{1}{2})\varphi(x) = \frac{E}{\hbar w}\varphi(x) \rightarrow (b^+b)\varphi(x) = \underbrace{(\frac{E}{\hbar w} - \frac{1}{2})}_{\lambda}\varphi(x)$$

Eigenwertgleichung:

$$b^+b\varphi = \lambda\varphi \Rightarrow \lambda = \frac{E}{\hbar w} - \frac{1}{2}$$

aus $\lambda b\varphi = (bb^+)b\varphi \underbrace{=}_{Kommutator} (\hat{1} + b^+b)(b\varphi)$ folgt:

$$b^+b(b\varphi) = (\lambda - 1)(b\varphi) \tag{7}$$

$$b^+b(b^+\varphi) = b^+(b^+b+1)\varphi = \underbrace{(\lambda+1)}_{Eigenwert} \underbrace{(b^+\varphi)}_{Eigenzustand} \tag{8}$$

aus (7) und (8) folgt:
$(b^+)^n\varphi$ ist Eigenzustand zum Eigenwert $(\lambda + n)$
$(b)^m\varphi$ ist Eigenzustand zum Eigenwert $(\lambda - m)$

Da die Energieeigenwerte $E \geq 0$ sein müssen, muss es ein $b\varphi_0 = 0$ geben:

$$b^+b\varphi_0 = \lambda_0\varphi_0$$

Das heißt es gilt: $(\alpha x + \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx})\varphi_0(x) = 0 \rightarrow \varphi_0' = -\alpha^2 x\varphi_0 \equiv$Gaussfunktion.
Es folgt:

$$\varphi_0(x) = ce^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

Nach Normierung ergibt sich dafür:

$$\varphi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

6.3 Lösung für den qm harm. Oszi.

Daher gilt: b^+b hat die

- Eigenwerte $\lambda_n = n \in \mathbf{N}$ und
- Eigenfunktionen
$$\varphi_n(x) = c_n(b^+)^n\varphi_0(x)$$
- Damit ergeben sich die Energieeigenwerte:
$$E_n = \hbar w(n + \frac{1}{2})$$

Die Eigenfunktionen bilden ein orthonormales Fktsystem. Alles vorherige eingesetzt ergibt sich dann:

$$\varphi_n(x) = (-1)^n\sqrt{\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}}e^{\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(\frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx})^n e^{-\alpha^2x^2}$$

6.4 Hermite-Polynome n-ten Grades

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2}(\frac{d}{dy})^n e^{-y^2}$$

6.5 Darstellung der Eigenfktnen des harm. Oszis

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

7 Streuzustände für den 1-dim Potentialtopf

$$V(x) = \{ \begin{array}{ccc} 0 & : & |x| \geq \frac{a}{2} \\ -V_0 & : & |x| < \frac{a}{2} \end{array}$$

- $E < 0$ gebundene Zustände mit disktreten Eigenwerten E_n (in Übung bearbeitet)
- $E > 0 \Rightarrow$ Streuzustände

Mit SG $(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x))\psi(x) = E\psi(x)$ folgt:

$$\psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$$

Folglich für:

- $|x| \geq \frac{a}{2} : \psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$
- $|x| < \frac{a}{2} : \psi''(x) + \chi^2\psi(x) = 0$

mit $\hbar k = \sqrt{2mE}$ und $\hbar\chi = \sqrt{2m(E - V_0)}$

Lösung der DGL:

$$\psi_k(x) = \{ \begin{array}{ccc} e^{ikx} + r_k e^{-ikx} & : & x \to -\infty \\ t_k e^{ikx} & : & x \to \infty \end{array}$$

Wie kommt man auf diese Gleichungen???

Diese Definition entspricht Zerlegung in einfallende und reflektierte Welle ($x \to -\infty$) und transmitierte Welle ($x \to \infty$)

7.1 Wronski-Determinante

Seien u_1 und u_2 2 Lösungen der SG zur gleichen Energie:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u_1'' + Vu_1 = Eu_1 \tag{9}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u_2'' + Vu_2 = Eu_2 \tag{10}$$

Die beiden Gleichungen mit dem jeweils Komplementären u multipliziert und voneinander subtrahiert ergeben:

$$\to u_2u_1'' - u_1u_2'' = 0 \to \frac{d}{dx}(u_2u_1' - u_1u_2') = 0$$

$$\to u_2u_1' - u_1u_2' = const = W$$

(Konstanz der Wronski-Determinante)
Setze nun $u_1 = \psi_k(x)$ und $u_2 = \psi_k^*(x)$ dann folgt:

$$x > \frac{a}{2} \qquad u_1u_2' - u_2u_1' = -2ik|t_k|^2 \tag{11}$$

$$x > -\frac{a}{2} \quad u_1u_2' - u_2u_1' = -2ik|1 - r_k|^2 \tag{12}$$

Hieraus folgt:

$$1 - |r_k|^2 = |t_k|^2$$

Definition:

- Reflektionskoeffizient $R = |r_k|^2$
- Transmissionskoeffizient $T = |t_k|^2$
- $R + T = 1$

Ausrechnen ergibt für den Transmissionskoeffizienten:

$$T = |t_k|^2 = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(\frac{1}{\alpha} - \alpha)^2 sin^2(\chi a)}$$

D.h. es gibt sogenannte Resonanzen, wenn n halbe Wellenlangen (bzgl. χ) präzise in den Potentialtopf passen.

8 Impulsdarstellung

8.1 Mittelwert des Impulses (Ortsraum → Impulsraum)

Im Ortsraum gilt:

$$<\hat{p}> = \int dx \psi^*(x,t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t)$$

Mit der Annahme, dass sich $\psi(x,t)$ darstellen lässt als:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k) e^{-ikx}$$

so dass sich mit Fourieranalyse

$$\tilde{\psi}(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \psi(x,t) e^{ikx}$$

ergibt:

$$\int dx \psi^*(x,t) \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \int dk \tilde{\psi}(k,t) k e^{ikx} =$$

$$= \hbar \int dk' \tilde{\psi}^*(k',t) \int dk \tilde{\psi}(k,t) k \underbrace{(\frac{1}{\sqrt{2\pi}})^2 \int dx e^{i(k-k')x}}_{\delta(k-k')}$$

und so folgt für den Impuls im Impulsraum:

$$<\hat{p}> = \int dk \hbar k |\tilde{\psi}(k,t)|^2$$

Interpretation: $|\tilde{\psi}(k,t)|^2 dk \equiv$Wahrscheinlichkeit, den (durch $\hbar$ geteilten) Impuls zur Zeit t im Intervall $[k, k+dk]$ zu finden.

8.2 Mittelwert der Ortskoodinate (Impulsraum)

$$<\hat{x}> = \int \tilde{\psi}^*(k,t)(-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k})\tilde{\psi}(k,t)$$

8.3 Hamiltonoperator (Impulsraum)

Einsetzten des Impulses und Ortes in den Hamiltonoperator, ergibt:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dkH(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},x)\tilde{\psi}(k,t)e^{ikx}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int dk(i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\tilde{\psi}(k,t)e^{ikx}$$

Das bedeutet, beim Übergang vom Orts- in den Impulsraum ergibt sich:

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\rightarrow\hbar k$$

$$x\rightarrow-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial k}$$

Mit neuer Impulswariable $p=\hbar k$ folgt:

$$\tilde{\psi}(p,t)=\frac{1}{\sqrt{\hbar}}\tilde{\psi}(k,t)$$

Fuck damn Wurzel! Woher (?)

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\tilde{\psi}(p,t)e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

8.4 Mittelwert des Impulses (Impulsraum)

$$<\hat{p}>=\int dp\tilde{\psi}^*(p,t)p\tilde{\psi}(p,t)$$

8.5 Mittelwert des Ortes (Impulsraum)

$$<\hat{x}>=\int dp\tilde{\psi}^*(p,t)(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p})\tilde{\psi}(p,t)$$

8.6 SG in Impulsdarstellung (Impulsraum)

$$H(p,-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p})\tilde{\psi}(p,t)=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t)$$

8.7 stationäre SG in Impulsdarstellung (Impulsraum)

$$H(p,-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p})\tilde{\varphi}(p)=E\tilde{\varphi}(p)$$

Die Fouriertransformation vermittelt den Übergang von der Orts- zur Impulsdarstellung.

8.8 Vertauschungsrelation

$$[\hat{p},\hat{x}]=\{\begin{array}{ccc}[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},x] & & Orts- \\ & =\frac{\hbar}{i} & & darstellung \\ -[p,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}] & & Impuls-\end{array}$$

8.9 Beispiel harm. Oszillator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m}{2}w^2\hat{x}^2 = \{ \begin{array}{lll} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m}{2}w^2x^2 & Orts- & \\ & & darstellung \\ \frac{p^2}{2m} - \frac{m}{2}w^2\hbar^2\frac{d^2}{dp^2} & Impuls- & \end{array}$$

Ebenewelle im Impulsraum unklar (?) Ebene Welle fon Seitenende (?)

8.10 Erweiterung auf 3 Raumdimensionen

$$\begin{array}{lll} x \to \mathbf{r} \quad \hat{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{p}} & Orts- & \\ & & darstellung \\ p \to \mathbf{p} \quad \hat{x} \to -\frac{\hbar}{i}\nabla_{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{r}} & Impuls- & \end{array}$$

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d^3p\tilde{\psi}(\mathbf{p},t)e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{pr}}$$

9 Allgemeines Schema der QM

9.1 Dirac-Schreibweise

Ein QM-System ist gekennzeichnet durch einen Zustandsvektor.
$|f>$ (Wellenfunktion) (?) ist ein Element aus einem komplexen Vektorraum, dem Hilbertraum und wird Ket-Vektor genannt.

Eigenschaften des Hilbertraumes:

- Skalarprodukt, Metrik
- Vollständigkeit
- Seperabilität

Zu jedem 'Ket' gibt es ein 'Bra': dualer Raum: $(|f>)^* = <f|$
Jedem Paar $|f>, |g>$ ist eine komplexe Zahl zugeordnet (Skalarprodukt, mit gelernten Eigenschaften)

Eigenschaften der Operatoren

- Linear
- Adjungierter Operator mit
  $(A+B)^+ = A^+ + B^+$;
  $(AB)^+ = B^+A^+$;
  $(A^+)^+ = A$;
- Hermitesche Operatoren: $A^+ = A$
- Unitäre Operatoren: $U^+U = UU^+ = \hat{1}$
  d.h. $U^+ = U^{-1}$
  speziell gilt: $\|Uf\| = \|f\|$

- Wichtige Regeln:
  A und αA hermitesch $\Leftrightarrow$ α reell
  A, B und AB hermitesch $\Leftrightarrow$ $[A, B]$ hermitesch
  Mit A ist auch A^n hermitesch und damit jedes Polynom mit reelen Koeffizienten
  Mit A ist auch B^+AB hermitesch
  Speziell: $B = U$ unitär $\Rightarrow U^{-1}AU$ hermitesch

- Projektionsoperator
  Sei $< u|u >= 1$ (=normiert) und $P_u := |u >< u|$
  dann ist $P_u|f >= f_u|u >$ mit $f_u =< u|f >$ und $P_u^2 = |u >< u|u >< u| = P_u \Rightarrow P_u = P_u^2$ (ist definierte Eigenschaft des Projektionsoperators)

- vollständiges Funktionensystem (=orthonormiert, $|u_n >$ bilden Basis)
  $\sum_{n=1}^{\infty} |u_n >< u_n| = \hat{1}$
  $\Rightarrow |f >= \sum_{n=1}^{\infty} |u_n >< u_n|f >= \sum_{n=1}^{\infty} f_n|u_n >$
  Die Koeffizienten $f_n = f(u_n) =< u_n|f >$ heißen:
  Darsteller von f in der u-Basis

- Skalarprodukt
  $< f|g >=< f|\hat{1}|g >= \sum_{n=1}^{\infty} < f|u_n >< u_n|g >= \sum_{n=1}^{\infty} f(u_n)^* g(u_n)$

- Darstellung von Operatoren

  $$\hat{A} = \hat{1}\hat{A}\hat{1} = \sum_{n=1}^{\infty} |u_n >< u_n|\hat{A}|u_m >< u_m| = \sum_{n=1}^{\infty} |u_n > A_{mn} < u_m|$$

  mit $A_{nm} =< u_n|\hat{A}|u_m >$
  Weiter gilt: $A_{nm} =< \hat{A}^+ u_n|u_m >=< u_m|\hat{A}^+ u_n >^* = (A_{mn})^* = A_{nm}$
  mit A_{nm} als Darstellungsmatrix von $\hat{A}$ in der u-Basis.
  Beispiel: Die Eigenfunktionen φ_n des harm. Oszis bilden eine Basis:
  $< \varphi_n|b^+b|\varphi_m >= m\delta_{nm}$
  $< \varphi_n|b|\varphi_m >= b_{nm}$

- Operatorprodukt

  $$\hat{C} = \hat{A}\hat{B} = \hat{1}\hat{A}\hat{1}\hat{B}\hat{1} = \sum_{n,m,l} |u_n > A_{nm}B_{ml} < u_l| = \sum_{n,l} |u_n > C_{nl} < u_l|$$

  mit $C_{nl} = \sum_m A_{nm}B_{ml} = (AB)_{nl}$

- Basiswechsel
  Geg. seien 2 Basen: $|u_n >, |v_n >$ mit $\hat{1} = \sum_n |u_n >< u_n| = \sum_m |u_m >< u_m|$

  $$\Rightarrow |u_n >= \sum_m u_{mn}|v_m >$$

  mit $u_{mn} =< v_m|u_n >$
  Die Matrix u_{mn} vermittelt den Übergang von der v- zur u-Basis
  u_{mn} ist Darsteller eines unitären Operators. $\Rightarrow UU^+ = \hat{1}$
  Es gilt für die darstellenden Matritzen von Operatoren: $\tilde{A}_{mn} = (\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1})_{mn}$

9.2 Das Eigenwertproblem

- Sei A ein linearer Operator. Die Eigenwertgleichung:

$$A|\varphi >= a|\varphi >$$

  mit $a \in \mathbf{C}$, $a \equiv$ Eigenwert

- Beispiel: harm. Oszi:

$$\hat{H}|n >= \underbrace{\hbar w(n + \frac{1}{2})}_{E_n} |n >$$

- Wenn $\hat{U}$ unitär und $\hat{U}|\varphi >= u|\varphi >$, dann ist: $u = e^{i\alpha}$ mit $\alpha \in \mathbf{R}$

- weiter gilt Normerhaltung unitärer Operatoren

- Aus $a < u_n|a >= \sum_m A_{nm} < u_m|a >$ ergibt sich die Bestimmungsgleichung für die Eigenwerte (Säkulargleichung):

$$det(A_{nm} - a\delta_{nm}) = 0$$

- Entartung:
  Es sei $\hat{A}$ ein hermitescher Operator. Dann:
  Gibt es zum Eigenwert a p linear unabhängige Eigenvektoren $|\varphi_1 >, ..., |\varphi_p >$, so ist der Eigenwert p-fach entartet.
  Alle Eigenvektoren zu einem Entarteten Eigenwert bilden einen (endlichen oder seperablen) vollständigen Unterraum von **H**

9.3 orthonormiertes System

Fasse nun alle in **H** liegenden Funktionen $|\varphi_a >$ mit $\hat{A}|\varphi_a >$ zu einem orthonormieren System zusammen.

2 Möglichkeiten:

- (Fall 1) Die $|\varphi_a >$ sind vollständig, d.h. $\sum_a |\varphi_a >< \varphi_a| = \hat{1}$. Das Spektrum ist diskret. (Punktspektrum)

- (Fall 2) Die $|\varphi_a >$ sind unvollständig. Das Spektrum ist ein kontinuierliches Punkt- und Streckenspektrum, d.h es enthält kontinuierliche Anteile.

Wir betrachten im folgenden nur solche hermitesche Operatoren $\hat{A}$ (Observable), bei denen durch Hinzunahme von uneigentlichen Vektoren $|a_\lambda >$ dennoche ine Basis entsteht.

- $\hat{A}|a_n >= a_n|a_n > \Rightarrow$ diskreter Teil des Spektrums, normierbare Eigenfunktionen

- $\hat{A}|a_\lambda >= a_\lambda|a_\lambda > \Rightarrow$ kontinuierlicher Teil des Spektrums, nicht normierbare Eigenfunktionen

$$\Rightarrow \sum_n |a_n >< a_n| + \int d\lambda |a_\lambda >< a_\lambda| = \hat{1}$$

zu (Fall 1):

- Spektraldarstellung von $\hat{A}$:
- $\hat{A}\hat{1} = \hat{A}\sum_n |a_n >< a_n| = \sum_n a_n |a_n >< a_n| = \hat{A}$
- Für den harm. Oszi bedeutet dies:
- $\hat{H} = \sum_n E_n |n >< n| = \sum_n \hbar w(n + \frac{1}{2})|n >< n|$

zu (Fall 2):

- speziell für reines Streckenspektrum:
- $\hat{A}|a_\lambda >= a_\lambda |a_\lambda >$, $\hat{1} = \int dy |a_\lambda >< a_\lambda|$
- Für $|f >\in \mathbf{H}$ gilt:
- $|f >= \int d\lambda |a_\lambda >< a_\lambda | f >= \int f \nabla f_\lambda |a_\lambda >$
- mit $f_\lambda =< a_\lambda | f >\equiv$Darsteller von $|f >$ in der kontinuierlichen a_λ-Basis

Das bedeutet:

- $< a_\lambda | a'_\lambda >= \delta(\lambda - \lambda')$ (korrekt normieren!)
- Spektraldarstellung: $\hat{A}\hat{1} = \int d\lambda a_\lambda |a_\lambda >< a_\lambda|$
- Projektionsoperator $\hat{P}(\lambda_2, \lambda_1) = \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} d\lambda |a_\lambda >< a_\lambda|$

Wichtiger Satz für hermitesche Operatoren:
Zwei hermitesche Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ besitzen eine simultane Eigenbasis $\Leftrightarrow$ $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$

10 Deduktiver Aufbau der QM

Wir fassen zunächst zusammen:

- Ein QM-Zustand eines Systems wird beschrieben durch einen normierten Vektor $|\psi(t) >\in \mathbf{H}$
- Physikalische Messgrößen werden hermiteschen Operatoren zugeordnet (Observablen)
- Das Skalarprodukt mit einem Hilberraumvektor $|\varphi >$ definiert eine Wahrscheinlichkeitsamplitude $< \varphi|\psi(t) >$. Ihr Absolutquadrat $| < \varphi|\psi(t) > |^2$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass zur Zeit t im Zustand $|\psi(t) >$ der Vektor $|\varphi >$ enthalten ist.
- Die kartesischen Komponenten des Ortes und des Impulses erfüllen die Vertauschungsregeln:

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_k] = [\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0; [\hat{p}_i, \hat{x}_k] = \frac{\hbar}{i}\delta_{ik}$$

- Zeitliche Änderung des qm. Zustands $|\psi(t) >$ wird beschrieben durch die SG:
$$\hat{H}|\psi(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t) >$$

Erläuterungen:

- Die QM ist eine lineare Theorie: Superposition von Zuständen ist möglich
- Experimente ergeben reelle Meßwerte. Einer Observablen entspricht genau dann einer Zahl, wenn sie auf einen Eigenvektor wirkt. (Meßwerte ¡-¿ Eigenwerte)
- An einem qm. System $|\psi(t) >$ wird zur Zeit t eine Observable $\hat{A}$ gemessen. Das Messergebnis a wird mit der Wahrscheinlichkeit
$$| < a|\psi(t)|^2$$
($< a|$ ist ein Zustand, $\hat{A}|a >= a|a >$) und
$$< \psi|\psi >= \sum_n |a_n|\psi > |^2 + \int d\lambda| < a_\lambda|\psi|^2 = 1$$
$\hat{A}$ ist 'scharf', wenn $|\psi >= |a_m >$ ($< a_n|a_m >= \delta_{nm}$, $< a_\lambda|a_m >= 0$ (?) $a_m >$)
Sei der Eigenwert a p-Fach entartet, d.h. $\hat{A}|a_k >= a|a_k >$ mit $k = 1, ..., p$, dann gilt, dass $\sum_{k=1}^p |a_k|\psi(t) > |^2 \equiv$ Wahrascheinlichkeit, im Zustand $|\psi(t) >$ zur Zeit t bei Messung der Observablen A das Resultat a zu erhalten.
- Nichttriviale Vertauschungsregeln werden natürlich auch für Observable benötigt, die Funktionen von Ort und Impuls sind.
- Die SG ist die qm. Bewegungsgleichung, mit der $|\psi(t) >$ für bel. Zeiten folgt, wenn $|\psi(t_0) >$ bekannt ist.

11 Die Unschärferelation

In einem normierten Zustand $|\psi >$ hat $\hat{A}$ den Erwartungswert
$$< A >=< \psi|\hat{A}|\psi >$$

Die Abweichungen vom Mittelwert ($equiv$Erwartungswert) werden charakterisiert durch das mittlere Schwankungsquadrat:
$$(\triangle A)^2 =< (\hat{A}- < A >)^2 >=< \hat{A}^2 > - < \hat{A} >^2 \geq 0$$

$\triangle A = \sqrt{(\triangle A)^2}$ heißt Streuung der Unschärfe der Observablen A im Zustand $|\psi >$.

Herleitung unklar (?)

Es folgt mit $[\hat{A},\hat{B}]=\frac{\hbar}{i}$:

$$(\hat{A})(\hat{B})\geq\frac{\hbar}{2}$$

(Heisenberg'sche Unschärferelation)
Beweis unklar (?)
Allgemeine Form

$$(\hat{A})(\hat{B})\geq\frac{1}{2}\sqrt{<\psi|[A',B']|\psi>^2}=\frac{1}{2}<\psi|[A,B]|\psi>$$

Gleichheit gilt, wenn CSU Gleichheit erfüllt ist. (?) vgl Beweis

12 Schrödinger- und Heisenbergbild

Annahme: $\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$ sei nicht explizit abhängig, $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0$
Formale Integration der SG:

$$|\psi(t)>=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)>$$

Dabei ist $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t)^n$ (Reihenentwicklung) ein unitärer Operator.

$$\hat{U}(t,0)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t};\hat{U}^{+}=\hat{U}^{-1}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$
$$|\psi(t)>=U(t,0)|\psi(0)>$$
$$U(t_2,t_1)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_2-t_1)};U(t_2,t_1)|\psi(t_1)>=|\psi(t_2)>$$

Dieses Konzept der Zeitentwicklung kennzeichnet das sogenannte Schrödingerbild.

12.1 Schrödingerbild

Wellenfunktionen/Vektoren sind zeitabhängig:

$$|\psi_S(t)>=U(t,0)|\psi_S(0)>$$

Operatoren sind zeitunabhängig: $\hat{A}_s(t)=A_S$

12.2 Heisenbergbildbild

Vektoren sind zeitunabhängig $|\psi_H>=|\psi_s(0)>$
Operatoren sind zeitabhängig:

$$\hat{A}_H(t)=U^{-1}A_SU$$

Im Heisenbergbild gilt:

$$\hat{A}_H(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_Se^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

Bewegungsgleichung im Heisenbergbild:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}_H(t)=\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{A}_H(t)]$$

Falls $\hat{A}$ explizit von der Zeit abhängt gilt:

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

Vergleiche hierzu die klassischen Poissonklammern.

12.3 Äquivalenz der Bilder

Beide Bilder sind äquivalent, da die Mittelwerte unabhängig vom Bild sind:

$$\underbrace{<\psi_S(t)|A|\varphi_S(t)>}_{Schroe(?)dingerbild} = <\psi_S(0)|U^+ A_S U|\varphi_S(0)> = \underbrace{<\psi_S(0)|\hat{A}_H|\varphi_S(0)>}_{Heisenbergbild}$$

13 Gemische, Quantenstatistik

Im folgenden sei das Schrödingerbild gewählt. Der qm. Zustand ist ein Hilbertraumvektor $|\psi(t)>$.
In einem reinen Fall (einer reinen Gesamtheit) gibt es maximale Kenntnis über den qm. Zustand.
Aber: Die Kenntnis über einen qm. Zustand kann unvollständig sein, nur statistische Aussagen sind möglich.

13.1 Definition Gemisch

Es liegt ein Gemisch vor, wenn die Zustände der untersuchten Systeme nicht durch einen einzigen Hilbert-Raum-Vektor erfasst werden, sondern durch mehrere $|\psi_\nu>$ gekennzeichnet sind.
In dieser Gesamtheit ist $|\psi_\nu>$ mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit w_ν mit

$$\lim_{N\to\infty} \frac{N_\nu}{N} = w_\nu$$

enthalten.
Für Messwerte gilt folgich:

$$<A> = \sum_\nu w_\nu <\psi_\nu|A|\psi_\nu>$$

mit dem Dichteoperator:

$$\hat{W} = \sum_\nu w_\nu |\psi_\nu><\psi_\nu|$$

(statistischer Operator) damit folgt:

$$<\hat{A}> = \sum_\nu <\psi_\nu|\hat{W}\hat{A}|\psi_\nu> = Spur(\hat{W}\hat{A})$$

13.2 Schrödingerbild

Von Neumann Gleichung:

$$\dot{W}_S(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \dot{W}_S(t)]$$

Sonderstellung: einziger Operator im Schrödingerbild, der zeitabhngig ist.

14 Physikalisch interessante Darstellung