Grundlagen der Quantenmechanik

Wellenfunktion, beschreibt den Zustand des Systems : $\psi(\vec{r},t)$

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte : $|\psi(\vec{r},t)|^2$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte: $\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\{\psi^*(\vec{r},t)\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t) - \psi(\vec{r},t)\vec{\nabla}\psi^*(\vec{r},t)\}$

Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \hat{H}\,\psi(\vec{r},t)}$$

Hamiltonoperator $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\vec{r},t) = -\frac{\hbar^2\vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{r},t)$

Impulsoperator $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$

Vertauschungsrelation

$$\boxed{[\hat{r}_j, \hat{p}_{j'}] = i\hbar\,\delta_{j,j'}}$$

Erwartungswerte

Ort $<\vec{r}>_t = \int \psi^*(\vec{r},t)\;\vec{r}\;\psi(\vec{r},t)\;d^3r$

Impuls $<\hat{\vec{p}}>_t = \int \psi^*(\vec{r},t)\;\hat{\vec{p}}\;\psi(\vec{r},t)\;d^3r$

Energie $<\hat{H}>_t = \int \psi^*(\vec{r},t)\;\hat{H}\;\psi(\vec{r},t)\;d^3r = E$

Für $\hat{H}$ unabhängig von der Zeit gilt:

$\boxed{\hat{H}\varphi_n(\vec{r}) = E_n\,\varphi_n(\vec{r})}$ Stationäre Schrödinger-Gleichung

E_n: Energie des n-ten Zustandes (n-ter Eigenwert)

$\varphi_n(\vec{r})$: Ortsanteil der Wellenfunktion des n-ten Zustandes (n-te Eigenfunktion)

$\psi(\vec{r},t) = e^{\frac{E_n}{i\hbar}t}\,\varphi_n(\vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\,\varphi_n(\vec{r})$ Wellenfunktion des Zustandes mit Energie E_n

$\boxed{\psi(\vec{r},t) = \sum_n c_n\,e^{\frac{E_n}{i\hbar}t}\,\varphi_n(\vec{r})}$ Allgemeine Form der Wellenfunktion

Koeffizienten c_n z.B. aus Anfangsbedingung: $c_n = \int \varphi_n^*(\vec{r})\;\psi(\vec{r},0)\;d^3r$

Unschärfe: $\Delta p_j = \sqrt{<\hat{p}_j^2> - <\hat{p}_j>^2}$

Unschärferelation $\boxed{\Delta r_j \; \Delta p_{j'} \;\; \geq \;\; \frac{\hbar}{2} \; \delta_{j,j'}}$

Sätze von Ehrenfest $\boxed{\frac{d}{dt} < \hat{O} >_t \; = \; \frac{i}{\hbar} \; < [\hat{H}, \hat{O}] >_t \; + \; < \frac{\partial}{\partial t} \hat{O} >_t}$

Ort und Impuls: $\boxed{\frac{d}{dt} < \hat{\vec{r}} >_t \; = \frac{< \hat{\vec{p}} >_t}{m} \quad ; \quad \frac{d}{dt} < \hat{\vec{p}} >_t \; = \; < \vec{F}(\hat{\vec{r}}) >_t}$

Dirac-Notation

$<\phi|$: bra ; $|\psi>$: ket ; $<\phi \mid \hat{O} \mid \psi> = \int \phi^*(\vec{r},t) \; \hat{O} \; \psi(\vec{r},t) \; d^3r$

Harmonischer Oszillator

$$\boxed{\begin{array}{l} \hat{H} \; = \; \frac{\hat{p}^2}{2m} \; + \; \frac{1}{2} \, k \, x^2 \; = \; \hbar \, \omega \; (\hat{a}^\dagger \hat{a} \; + \; \frac{1}{2}) \qquad \text{mit} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \\ [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad ; \quad \hat{a} \; |\varphi_n> = \sqrt{n} \; |\varphi_{n-1}> \quad ; \quad \hat{a}^\dagger \; |\varphi_n> = \sqrt{n+1} \; |\varphi_{n+1}> \\ \hat{H} \; |\varphi_n> = \hbar\omega \; (n + \frac{1}{2}) \; |\varphi_n> \end{array}}$$

Drehimpuls

$$\boxed{\begin{array}{l} \hat{L} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} \qquad ; \qquad [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \; = \; i\hbar \hat{L}_z \quad \text{(zyklisch)} \\ \hat{L}^2 \; Y_{\ell,m} = \hbar^2 \; \ell(\ell+1) \; Y_{\ell,m} \qquad \text{mit} \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \ldots \\ \hat{L}_z \; Y_{\ell,m} = \hbar \; m \; Y_{\ell,m} \qquad \qquad \text{mit} \quad -\ell \leq m \leq \ell \end{array}}$$

Wasserstoffatom

$\hat{H} \; \chi_{n,m,\ell}(\vec{r}) \; = \; E_n \; \chi_{n,m,\ell}(\vec{r})$ mit $\chi_{n,m,\ell}(\vec{r}) \; = \; R_{n,\ell}(r) \; Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$

und $E_n \; = \; -\frac{1}{n^2}$ Rydberg

Teilchen mit Ladung Q im elektromagnetischen Feld:

$$\hat{H} \; = \; \frac{(\hat{\vec{p}} - Q \; A(\vec{r},t))^2}{2m} \; + \; V(\vec{r},t) \qquad ; \qquad V(\vec{r},t) = Q \; \Phi(\vec{r},t)$$

Spin

Spinoperator: $\hat{\vec{S}}$; $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar \; \hat{S}_z$ (zyklisch)