Formelsammlung Quantenmechanik I
Sommersemester 2004, Prof. W. Kinzel

1. **Wahrscheinlichkeitsverteilungen:**

   für den Ort: $|\psi(\vec{x},t)|^2 \; d^3x$,

   für den Impuls: $\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^3} \; |\varphi(\vec{p},t)|^2 \; d^3p$.

2. **Mittelwert eines Operators $\hat{\mathbf{A}}$ im Zustand $|\psi\rangle$:**

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int \psi^*(\vec{x},t)\; \hat{A}\; \psi(\vec{x},t)\; d^3x$$

3. **Streuung der Meßwerte von $\hat{\mathbf{A}}$:**

$$\Delta\hat{A} = \sqrt{\langle(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)^2\rangle} = \sqrt{\langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2}$$

4. **Freies Teilchen :** $\psi(\vec{x},t) = C\;\exp\left\{\dfrac{i}{\hbar}\left(\vec{p}\cdot\vec{x} - \dfrac{p^2}{2m}t\right)\right\}$

5. **Freies Gaußsches Wellenpaket :**

$$\psi(x,t) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\;(8\pi d^2)^{\frac{1}{4}}\;\exp\left\{-\frac{(p-p_0)^2 d^2}{\hbar^2} + \frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2 t}{2m}\right)\right\}$$

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{2\pi(1+\Delta^2)}}\;\exp\left\{-\frac{(x-vt)^2}{2d^2(1+\Delta^2)}\right\}$$

$$v = p_0/m\;;\;\; \Delta = t\hbar/(2md^2)$$

$$\langle x\rangle = vt\;;\;\; \Delta x = d\sqrt{1+\Delta^2}\;,\;\; \langle p\rangle = p_0\;,\;\; \Delta p = \hbar/2d$$

6. **Korrespondenzprinzip im Ortsraum:**

$$\vec{p} \to \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}, \qquad E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \qquad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + V(\vec{x})$$

7. **Schrödingergleichung:**

   $\hat{H}\psi(\vec{x},t) = i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\;\psi(\vec{x},t)$; stationär: $\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\;\psi(\vec{x})\;;\;\psi(\vec{x},t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\vec{x})$

8. **Kommutatoren:** $[x_i, \hat{p}_j] = i\hbar\;\delta_{ij}$

9. **Heisenbergsche Unschärferelation:** $\Delta\hat{A}\;\Delta\hat{B} \geq \dfrac{1}{2}\left|\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|$

10. **Zeitabhängigkeit von Mittelwerten:** $\dfrac{d}{dt}\left\langle\hat{A}\right\rangle = \dfrac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H},\hat{A}\right]\right\rangle + \left\langle\dfrac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle$

11. **Vollständiges Orthonormalsystem** $|\psi_n\rangle$ **:**

$\langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm}$; $\sum\limits_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1 \qquad |\psi\rangle = \sum\limits_n |\psi_n\rangle\,\langle\psi_n|\psi\rangle$

12. **Wahrscheinlichkeitsstromdichte:** $\vec{j}(\vec{x},t) = \dfrac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right]$

13. **Harmonischer Oszillator:**

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 = \hbar\omega\left[a^\dagger a + \frac{1}{2}\right]$$
$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(a + a^\dagger) \quad ; \quad p = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(a - a^\dagger)$$
$$[a, a^\dagger] = 1 \quad ; \quad a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle \;\; (n \in \mathbb{N}_0)$$
$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \quad ; \quad a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, a|0>= 0$$
$$\Delta x \Delta p = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar \quad \text{im Zustand } |n\rangle$$

14. **Stückweise konstantes Potential:**

$\psi(x) = A_i\; e^{i\,k_i\,x} + B_i\; e^{-i\,k_i\,x}$

$k_i = \sqrt{2m(E - V_i)}/\hbar$; $\psi(x)$, $\psi'(x)$ stetig.

15. **Unendlich hoher Potentialtopf für** $\mathbf{0 \leq x \leq a}$ **:**

$E_n = \dfrac{\hbar^2\,\pi^2}{2ma^2}n^2, \quad \varphi_n(x) = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\left(n\pi\dfrac{x}{a}\right) \qquad n \in \mathbb{N}$

16. **Drehimpulsoperator:**

$$\vec{L} = \frac{\hbar}{i}\left(\vec{x} \times \vec{\nabla}\right) \quad ; \quad L_\pm = L_x \pm iL_y \quad , [L_i, L_j] = i\,\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,L_k$$
$$\left(\vec{L}\right)^2|lm\rangle = \hbar^2\; l(l+1)\;|lm\rangle \quad ; \quad L_z|lm\rangle = \hbar m\;|lm\rangle$$
$$L_\pm\;|lm\rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m\pm1)}\;|l, m\pm1\rangle$$
$$l = 0, 1, 2, ... \quad \text{oder} \quad l = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, ...; \; m = -l, -l+1, -l+2, ..., l$$

17. **Teilchen im Zentralpotential:**

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \frac{u(r)}{r}\;\; Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r)\right]u(r) = E\;u(r)$$
$$u(0) = 0 \quad ; \quad \int\limits_0^\infty dr\;|u(r)|^2 < \infty$$

18. **Zentralpotential:**

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

19. **Coulomb–Potential** :

Quantenzahlen	$n = 1,2,3...$; $l = 0,1,2,...,n-1$; $m = -l,...,l$
Energien	$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2 n^2}$
Bohrscher Radius	$a = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-8} cm$
Rydberg–Konstante	$E_1(Z=1) = -13.6\ eV$

20. **Zweikörperproblem** :

$$H = \frac{\vec{p}_r^{\,2}}{2\mu} + V(\vec{x}_r) + \frac{\vec{p}_s^{\,2}}{2M} \quad ; \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad ; \quad M = m_1 + m_2$$

21. **Spinoperator** $\left(s = \frac{1}{2}\right)$:

$$\vec{S} = \tfrac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma} \quad ; \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \hat{1} \quad ; \quad \sigma_x\,\sigma_y = -\sigma_y\,\sigma_z = i\sigma_z \ \text{(zyklisch)} \quad ; \quad \sigma_x\sigma_y\sigma_z = i\hat{1} \quad ;$$

$$\mathrm{Sp}\sigma_x = \mathrm{Sp}\sigma_y = \mathrm{Sp}\sigma_z = 0 \quad ; \quad \det\sigma_x = \det\sigma_y = \det\sigma_z = -1$$

22. **Spinpräzession** :

$$H = -\frac{e}{mc}\vec{S}\cdot\vec{B} \quad ; \quad \vec{B}||\hat{z} \quad ;$$

$$|\psi(t=0)\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle\right)$$

$$|\langle\psi(t)\ |\psi(0)\rangle|^2 = \cos^2\tfrac{\omega_L t}{2} \quad ; \quad \langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\omega_L t \quad ; \quad \omega_L = \frac{|e|B}{m}$$

23. **Wechselwirkungsbild** :

$$H = H_0 + V \quad ; \quad H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \quad ; \quad |\psi(t)\rangle_w = e^{iH_0\,t/\hbar}\,|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$$

$$i\hbar\,\frac{d}{dt}c_n = \sum_m \langle n|V|m\rangle\, e^{i\,\omega_{nm}t}\, c_m(t) \quad \text{mit} \quad \hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$$

24. **Spinresonanz** :

$$\vec{B}(t) = B_0\hat{z} + B_1(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\sin\omega t) \quad ;$$

$$|\psi(t)\rangle_w = c_+(t)|\uparrow\rangle + c_-(t)|\downarrow\rangle \quad ; \quad |\psi(t=0)\rangle_w = |\downarrow\rangle$$

$$|c_+(t)|^2 = \frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + (\omega-\omega_0)^2}\ \sin^2\left\{\tfrac{t}{2}\sqrt{\omega_1^2 + (\omega-\omega_0)^2}\right\} \ \text{mit}\ \omega_i = \frac{|e|B_i}{m}$$

25. **Addition von Drehimpulsen** :

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \quad ; \quad \text{Basis} \quad |jm\,j_1\,j_2\rangle \quad \text{oder} \quad |j_1 m_1\,j_2 m_2\rangle$$

$$m = m_1 + m_2 \quad ; \quad |j_1 - j_2| \le j \le j_1 + j_2$$

26. **Addition zweier Spins mit** $s = 1/2$:

Triplett $|1\,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$

$|1\,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$

$|1\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)$

Singulett $|0\,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle)$

27. **Zeitunabhängige Störung (nicht entartet)**:

$$H = H_0 + \lambda H_1 \quad ; \quad H_0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle \quad ; \quad H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda\langle n^0|H_1|n^0\rangle + \lambda^2 \sum_{m\neq n} \frac{|\langle m^0|H_1|n^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} + O(\lambda^3) \quad ;$$

$$|n\rangle = |n^0\rangle + \lambda \sum_{m\neq n} \frac{\langle m^0|H_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle + O(\lambda^2)$$

28. **Zeitabhängige Störung** :

$H = H_0 + \lambda V(t) \quad ; \quad H_0|n\rangle = E_n|n\rangle \quad ; \quad \hbar\omega_{nk} = E_n - E_k$

$C_n = \langle n|U(t,t_0)|k\rangle = \delta_{n,k} - \frac{i\lambda}{\hbar} \int\limits_{t_0}^{t} e^{i\omega_{nk}t'}\ V_{nk}(t')\ dt' + O(\lambda^2)$

V konstant für $t \geq 0$: Übergänge für $|E_n - E_k|\ t \sim h$

$t \to \infty : w_{k\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\lambda^2\ |V_{nk}|^2\ \delta(E_n - E_k)$

V periodisch für $t \geq 0 : V(t) = 2V\cos\omega t$

$t \to \infty : \quad w_{k\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\lambda|V_{nk}|^2\,[\delta(E_n - E_k - \hbar\omega) + \delta(E_n - E_k + \hbar\omega)]$

29. **Identische Teilchen** :

Fermionen $\psi(1,...,i,...,j,...,N) = -\psi(1,...,j,...,i,...,N)$

Bosonen $\psi(1,...,i,...,j,...,N) = +\psi(1,...,j,...,i,...,N)$

30. **Slater–Determinante für Fermionen** :

$$\psi(1,...,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \varphi_{\alpha_1}(1) & ... & \varphi_{\alpha_1}(N) \\ \cdots & & \cdots \\ \varphi_{\alpha_N}(1) & ... & \varphi_{\alpha_N}(N) \end{pmatrix}$$