

Mündliche Theo Prüfung

Zusammenfassung des Stoffs aus Altprotokollen

bei Prof. Mühlleitner

20. Oktober 2015

1 Vorwort

Ich habe einfach die Fragen aus den alten Protokollen durchgeschaut und versucht die Antworten hierdrin zusammenzufassen. Es ist wild zusammengestückelt aus Wikipedia, Cohen Tannoudj und den Vorlesungsskripten von Schön und Mühlleitner. Daher keine Gewähr für Richtigkeit und es wurden sämtliche Vorgaben für wissenschaftliches Arbeiten und Zitieren missachtet, aber vielleicht hilft es dir als kleine Zusammenfassung =)

2 Theo D

2.1 Die 7 Grundpostulate der Quantenmechanik

1. Der Zustand eines physikalischen Systems zum Zeitpunkt t_0 wird durch einen Ket aus einem Hilbertraum $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ definiert

Hilbertraum \mathcal{H} : Reeller oder komplexer Vektorraum mit einem Skalarprodukt, der vollständig bezüglich der durch das Skalarprodukt induzierten Norm ist, er ist linear damit gilt Superposition. Z.b. quadratintegrale Funktionen L^2 $\langle f, g \rangle = \int \bar{f}(x)g(x)dx$

Eigenschaften eines Kets $|\psi\rangle$: Kann durch die Superposition von anderen Kets einer vollständigen orthonormalen Basis dargestellt werden. $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$ mit $\langle \phi_n | \phi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$ und $\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \mathbb{1}$

2. Jede messbare phsyikalische Größe (Ort, Impuls, Energie...) wird druch einen im Zustandsraum H wirkenden hermiteschen Operator A geschrieben, 'Observable'

3. Die möglichen Messwerte der Observablen A sind ihre Eigenwerte

Hermitesch: $A^\dagger = A$, $\langle \chi | A | \phi \rangle = (\langle \phi | A | \chi \rangle)^*$, die Eigenwerte sind reell. Falls das Spektrum von A diskret ist sind die möglichen Resultate bei der Messung von A Quantisiert.

4.

- Nicht Entartetes diskretes Spektrum:
Bei der Messung der Physikalischen Größe A in einem normierten Zustand $|\phi\rangle$:
Wahrscheinlichkeit den nicht entarteten Eigenwert a_n von A zu finden ist:

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 \qquad A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \qquad (1)$$

Falls das Spektrum von A diskret ist sind die möglichen Resultate bei der Messung von A quantisiert. $P(a_n)$ stellt hier die Wahrscheinlichkeit dar.

- g-fach entartetes diskretes Spektrum:

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^g |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 \qquad (2)$$

$\{|u_n^i\rangle\}$: System von orthonormierten Vektoren, bilden Eigenraum \mathcal{H}_n zum Eigenwert a_n von A eine Basis.

- Nicht entartetes kontinuierliches Spektrum:
Die Wahrscheinlichkeit dass die Messung einen Wert zwischen α und $\alpha + d\alpha$ liefert:

$$dP(\alpha) = |\langle V_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha \qquad A|V_\alpha\rangle = \alpha|V_\alpha\rangle \qquad (3)$$

P ist hier eine Wahrscheinlichkeitsdichte

5. Reduktion des Wellenpakets:

Nach der Messung mit dem Resultat a_n ist der Zustand des Systems unmittelbar nach der Messung gleich der auf 1 normierten Projektion von $|\psi\rangle$ auf den zu a_n gehörenden Eigenraum (Unterraum von \mathcal{H}).

$$|\psi\rangle \rightarrow \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} \qquad P_n = \sum_{i=1}^g |u_n^i\rangle\langle u_n^i| \qquad (4)$$

Mit dem Projektor P_n .

- Jede weitere Messung von A unmittelbar danach ändert den Zustand nicht mehr und liefert das gleiche Resultat.
- Sukzessive Messungen von Observablen aus einem vSkO führt auf einen Zustand der Eitenzustand von allen Observablen ist und damit eindeutig festgelegt

Messung: Summation über Zwischenzustände

Messung von A dann B dann C:

Zwischenzustand festgelegt

Messung von A und dann C:

Summation über alle Zwischenzustände: Interferenz

6. Die Zeitliche Entwicklung des Zustandsvektors $|\psi\rangle$ ist bestimmt durch die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (5)$$

$H(t)$ ist der Hamiltonoperator und die der Gesamtenergie zugeordnete Observable.

Eigenschaften der Schrödinger Gleichung:

- Ebene Wellen sind Lösungen: Welle Teilchen Dualismus, $p = \hbar k$, $E = \hbar \omega$
- linear in $|\psi\rangle \rightarrow$ Superposition von Lösungen ist wieder Lösung
- Homogen: Erhaltung der Norm $\int |\psi(r)|^2 dr = \int d^3r |\langle \psi | \psi \rangle|^2 = 1$, Erhaltung der Teilchenzahl
- In 1. Ordnung von t : Wenige Integrationskonstanten und damit anfangsbedingungen. $\psi(\vec{r}, t)$ ist festgelegt durch Angabe von $\psi(\vec{r}, 0)$

7. Korrespondenzregeln:

Zusammenhang von Klassischen Größen mit quantenmechanischen Observablen

$$x_i \rightarrow \hat{X}_i \quad (6)$$

$$p_i \rightarrow \hat{P}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (7)$$

Berücksichtige

$$[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0 \quad [\hat{P}_i, \hat{P}_j] = 0 \quad [\hat{P}_i, \hat{X}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}$$

Alle anderen Observablen die klassisch funktionen von x und p sind werden durch diese Substitutionen gewonnen.

Symmetrierungsregel wegen nichtverschwindendem Kommutator von r und p . Z.B. $\vec{r}\vec{p}$ muss hermitesch sein.

$$\vec{r}\vec{p} \rightarrow \frac{1}{2}(\hat{R}\hat{P} + \hat{P}\hat{R})$$
$$(\hat{R}\hat{P})^\dagger = \hat{P}^\dagger \hat{R}^\dagger = \hat{P}\hat{R} \neq \hat{R}\hat{P}$$

Vollständiger Satz kommutierender Observablen (vSkO):

Eine Menge von Observablen $\{A, B, C, \dots\}$ bildet genau dann einen vSkO wenn

- Alle Observablen paarweise miteinander vertauschen

- Wenn die Angabe aller Eigenwerte der Vektoren (bis auf einen Faktor) ausreicht um den Eigenvektor eindeutig zu bestimmen.

Ist $[A, B] = 0$ sind aber die Eigenwerte von A und B entartet so gibt es mindestens einen Operator C der mit A und B paarweise vertauscht.

Zeitunabhängige Schrödingergleichung

Separation der Variablen $\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})a(t)$, Annahme H ist Zeitunabhängig.

$$\begin{aligned} i\hbar\phi(\vec{r})\frac{\partial}{\partial t}a(t) &= a(t)H\phi(\vec{r}) \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\frac{a(t)}{a(t)} &= \frac{H\phi(\vec{r})}{\phi(\vec{r})} = \text{Const.} = E \\ \rightarrow H\phi(\vec{r}) &= E\phi(\vec{r}) \\ \rightarrow \psi(\vec{r}, t) &= \phi(\vec{r}) \cdot \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) \end{aligned}$$

Projektor

Entartet, Nicht entartet????

Zeitentwicklungsoperator

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

Aus der Schrödingergleichung erhält man damit allgemein

$$U(t + \delta t, t) = 1 - \frac{i}{\hbar}H(t)\delta t + O(\delta t^2)$$

In Zeitunabhängigen Systemen ($H(t_1) = H(t_2) \quad \forall t_1, t_2$) gilt mit der Eigenbasis von H $H|c_n\rangle = E_n|c_n\rangle$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \exp\left(-\frac{iH}{\hbar}(t - t_0)\right)|\psi(t_0)\rangle \\ &= \underbrace{\sum_n \exp\left(-\frac{iE_n}{\hbar}(t - t_0)\right)|c_n\rangle\langle c_n|}_{U(t, t_0)}\psi(t_0) \end{aligned}$$

Der Eigenwert E_n kann in den Exponenten gezogen werden indem U über die Potenzreihenentwicklung $\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$

Eigenschaften

Kontinuierlich $U(t_0, t_0) = 1$

Unitär $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = 1$

Propagatoreigenschaften $U(t, t_0) = U(t, t')U(t', t_0) \quad \forall t'$

Heisenberg und Schrödingerbild

	Schrödingerbild	Heisenbergbild
Zustand	$ \psi(t)\rangle = U(t, t_0) \psi_H\rangle$	$ \psi_H\rangle = \psi(t_0)\rangle$
Operator	A konstant in t	$A_H = U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0)$
Bewegungsgleichung	$(i\partial_t - H) \psi(t)\rangle = 0$	$\partial_t A_H = i[H, A_H]$
Erwartungswert	$\langle \psi_S(t) A_S \psi_S(t) \rangle =$	$\langle A \rangle = \langle \psi_H A_H(t) \psi_H \rangle$

Erwartungswert muss in beiden Bildern gleich sein.

$$\begin{aligned} \langle \psi_S | A_S | \psi_S \rangle &= \langle \psi_S | \underbrace{U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0)}_{=1} A_S U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) | \psi_S \rangle \\ &= \langle \psi_H | U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0) | \psi_H \rangle = \langle \psi_H | A_H | \psi_H \rangle \end{aligned}$$

mit $A_H = U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0)$

Herleitung der Bewegungsgleichung im Heisenbergbild (für Operatoren):

$$\frac{d}{dt}A_H = \frac{d}{dt}(U^\dagger A_S U) = \left(\frac{\partial U^\dagger}{\partial t}\right) A_S U + U^\dagger \left(\frac{\partial A_S}{\partial t}\right) U + U^\dagger A_S \left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)$$

Mit

$$\frac{\partial}{\partial t}U = -\frac{i}{\hbar}H_S U \qquad \frac{\partial}{\partial t}U^\dagger = \frac{i}{\hbar}U^\dagger H_S$$

folgt:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}A_H &= \frac{i}{\hbar}U^\dagger H_S A_S U - U^\dagger A_S \frac{i}{\hbar}H_S U + U^\dagger \left(\frac{\partial A_S}{\partial t}\right) U \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\underbrace{U^\dagger H_S U}_{H_H} \underbrace{U^\dagger A_S U}_{A_H} - U^\dagger A_S U U^\dagger H_S U \right) + \underbrace{U^\dagger \left(\frac{\partial A_S}{\partial t}\right) U}_{(\partial_t A_S)_H} \\ \frac{d}{dt}A_H &= \frac{i}{\hbar}[H_H, A_H] + (\partial_t A_S)_H \end{aligned}$$

Wechselwirkungsbild

Im Wechselwirkungsbild (oder Dirac Bild (deswegen Index D)) sind sowohl Operatoren als auch Zustände Zeitabhängig. Dabei wird von einem Hamiltonoperator ausgegangen der aus einem zeitunabhängigen Term H_0 und einem zeitabhängigen Term H_1 besteht.

$$H = H_0 + H_1(t)$$

Es wird der Zeitentwicklungsoperator U_0 definiert welcher nur den ungestörten Hamilton berücksichtigt:

$$U_0(t, t_0) = \exp\left(-i \frac{H_0(t - t_0)}{\hbar}\right)$$

Wiederum muss der Erwartungswert von einem Operator in allen Bildern gleich sein.

$$\langle \psi_S | A_S | \psi_S \rangle = \underbrace{\langle \psi_S | U_0^\dagger}_{\langle \psi_D |} \underbrace{U_0 A_S U_0^\dagger}_{A_D} \underbrace{U_0 | \psi_S \rangle}_{| \psi_D \rangle} = \langle \psi_D | A_D | \psi_D \rangle$$

Bisher wurde nur der Ungestörte Teil verwendet. Die zeitliche Entwicklung von Zuständen lässt sich nun mit der angepassten Schrödingergleichung berechnen, welche vom Störterm H_1 im Wechselwirkungsbild abhängt.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_D(t)\rangle = H_{1D}(t) |\psi_D(t)\rangle$$

Die zeitliche Entwicklung von Operatoren wird wie im Heisenberg Bild berechnet

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_D(t) = [A_D(t), H_0] + i\hbar \frac{\partial A_D(t)}{\partial t}$$

Zum Zeitpunkt $t = t_0$ stimmen alle drei Bilder überein:

$$\begin{aligned} A_D(t_0) &= A_H(t_0) = A_S(t_0) \\ |\psi_D(t_0)\rangle &= |\psi_H(t_0)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle \end{aligned}$$

Konstanten der Bewegung (Noethertheorem):

Operator A ist Integral der Bewegung:

- Alle Erwartungswerte sind zeitlich konstant
- $\partial_t A = 0$ und $[A, H] = 0$

Beispiele:

Homogenität des Raumes \rightarrow Translationsinvarianz: Impulserhaltung

Isotropie des Raumes \rightarrow Rotationsinvarianz: Drehimpulserhaltung

Homogenität der Zeit \rightarrow Zeitinvarianz: Energieerhaltung

Standardabweichung:

$$\Delta A = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

Unschärferelation:

$$\begin{aligned} \Delta A \cdot \Delta B &\geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] | \psi \rangle| \\ \Delta x \Delta p &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta E \Delta t &= F \Delta x \Delta t \propto \frac{\Delta p}{\Delta t} \Delta x \Delta t = \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

Ehrenfesttheorem:

Entwicklung des Erwartungswerts, Bewegungsgleichung für Operatoren

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|A|\psi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi|[H, A]|\psi\rangle + \langle\psi|\partial_t A|\psi\rangle$$

Herleitung:

Im Heisenbergbild sind die Zustände Zeitunabhängig daher gilt: $\frac{d}{dt}|\psi\rangle = 0$. Für die zeitliche Entwicklung des Erwartungswerts eines Operators A kann man die Ableitung daher schreiben

$$\left\langle\frac{dA_H}{dt}\right\rangle = \langle\psi_H|\frac{dA_H}{dt}|\psi_H\rangle = \frac{d}{dt}\langle A_H\rangle$$

Außerdem kann die Zeitabhängigkeit des Operators A_H zerlegt werden

$$\left\langle\frac{dA_H}{dt}\right\rangle = \underbrace{\left\langle\frac{\partial A_H}{\partial t}\right\rangle}_{\text{Heisenbergsche Bewegungsgleichung}} + \left\langle\frac{\partial A_S}{\partial t}\right\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[H, A_H]\rangle + \left\langle\frac{\partial A_S}{\partial t}\right\rangle$$

Damit ergibt sich die Bewegungsgleichung für den Erwartungswert des Operators A

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle A_H\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle[H, A_H]\rangle + \left\langle\frac{\partial A_S}{\partial t}\right\rangle \\ \frac{d}{dt}\langle A\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle[H, A]\rangle + \langle\partial_t A\rangle\end{aligned}$$

Da die Erwartungswerte unabhängig davon sind ob man im Schrödinger oder im Heisenberg Bild ist können die Indizes weggelassen werden.

Beispiel:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle\vec{R}\rangle(t) &= \left\langle\frac{\vec{P}}{m}\right\rangle(t) \\ \frac{d}{dt}\langle\vec{P}\rangle(t) &= -\langle\nabla V\rangle(t)\end{aligned}$$

$\langle\vec{R}\rangle$ ist der Schwerpunkt des Wellenpakets und stellt im klassischen Grenzfall den Ort \vec{r} des Teilchens dar. Ebenfalls im klassischen Grenzfall gilt $\langle\nabla V(R)\rangle \rightarrow \nabla V(r(t))$. Dies ergibt die Newtonsche Bewegungsgleichung

$$m\frac{d^2}{dt^2}r(t) = -\nabla V(r(t))$$

2.2 Beispiele

Woher kommt der $\exp(ikx)$ Ansatz?:

1-Dimensionale Schrödinger-Gleichung, Konstantes Potential

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \psi = E\psi$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi = C\psi$$

Mit der Konstante $C = 2m(E - V_0)/\hbar^2$. Diese DGL wird gelöst durch den Ansatz:

$$\psi(x) = A_{\pm} \exp(\pm\sqrt{C}x) = A \exp(\sqrt{C}x) + B \exp(-\sqrt{C}x)$$

Setze $\sqrt{C} = ik$ so erhält man den allgemeinen Ansatz mit ebenen Wellen.

Potentialstufe

1-Dimensional, Potential: $V(x) = V_0\Theta(x)$ Energie der ebenen Welle E

Fall 1: $E > V_0$

Ansatz für $x < 0$:

$$\phi_1(x) = Ae^{ik_0x} + A'e^{-ik_0x}$$

Ansatz für $x > 0$:

$$\phi_2(x) = Be^{ik_1x} + B'e^{-ik_1x}$$

Stetigkeit

$$\phi_1(0) = \phi_2(0)$$

$$A + A' = B + B'$$

$$\dot{\phi}_1(0) = \dot{\phi}_2(0)$$

$$Ak_0 - A'k_0 = Bk_1 - B'k_1 = k_1(A + A')$$

$$A(k_0 - k_1) = A'(k_1 + k_0)$$

Wir gehen davon aus dass die Welle von links einläuft, also kann der Koeffizient $B' = 0$ gesetzt werden.

Drei unabhängige Konstanten, setze $A = 1$

Aus der Schrödinger-Gleichung folgt:

$$H\phi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \phi = E\phi$$

$x > 0$:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} k_1^2 + V_0 \right] \phi = E\phi$$

$$\rightarrow k_1 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$$

$x < 0$:

$$k_0 = E \frac{2m}{\hbar^2}$$

Reflexionskoeffizient

$$\sqrt{R} = \frac{A'}{A} = \frac{k_0 - k_1}{k_0 + k_1}$$

$$T = 1 - R$$

Fall 2: $E < V_0$

Ansatz

$$\phi(x < 0) = Ae^{ik_0x} + A'e^{-ik_0x}$$

$$\phi(x > 0) = Be^{-\rho x} + B'e^{\rho x}$$

$B' = 0$ da die Wellenfunktion sonst divergiert. Stetigkeit

$$A + A' = B$$

$$ik_0(A - A') = -B\rho$$

Potentialtopf

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\text{oder } \psi(x) = C\sin(kx) + D\cos(kx)$$

$$\psi(0) = 0 = A + B$$

$$\psi(a) = 0 = Ae^{ika} + Be^{-ika}$$

$$e^{2ika} = 1 \rightarrow 2ka = 2\pi n$$

$$k = \frac{\pi n}{a}$$

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin\left(\frac{\pi n}{a}x\right)$$

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{a^2 2m}$$

A über die Normierungsbedingung $\int_0^a \psi(x) = 1$

1D-Harmonischer Oszillator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$$

Definiere die Auf und absteigeoperatoren a, a^\dagger

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right)$$

Diese Operatoren entziehen oder fügen dem System ein Energiequant $\hbar\omega$ hinzu und man kann somit den Zustand $|n\rangle$ verwenden der die Anzahl der Energiequanten im System beschreibt. Die Auf- und Absteigeoperatoren haben die Eigenwertgleichungen

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ \hat{n}|n\rangle &= a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle \end{aligned}$$

Damit wird der Hamiltonoperator zu

$$\begin{aligned} H &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \\ E_n &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(a^\dagger\right)^n |0\rangle \end{aligned}$$

Zeitentwicklung von Spin im B feld

2.3 Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom ist ein zweikörper Problem bei dem das Potential nur vom relativen Abstand der Teilchen abhängt, daher lässt sich das System als ein einkörper Problem vereinfachen mit der Reduzierten Masse

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

Da die Masse des Protons viel größer ist als die Masse des Elektrons ($m_P \approx 1800m_e$) ist es eine gute Näherung das Elektron im Coulombpotential des ruhenden Kerns zu betrachten.

Der Hamiltonoperator des Wasserstoff Atom ist damit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \right] \phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$$

Das Potential hängt nur von r ab damit ergibt sich eine geeignete Darstellung durch Kugelkoordinaten. Der Laplace Operator kann in Kugelkoordinaten umgeschrieben werden durch:

$$\Delta = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

Die Winkelableitungen fassen sich im Operator \vec{L}^2 zusammen. Damit wird der die Schrödingergleichung zu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2\mu r^2} \vec{L}^2 + V(r) \right] \phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$$

Dadurch ergeben sich die Vertauschungsrelationen für die Komponenten des Drehimpulses

$$[H, \vec{L}] = 0$$

Somit Erhalten wir den vSkO des Wasserstoffatoms durch die Operatoren $H \rightarrow (E)$, $\vec{L}^2 \rightarrow \hbar^2 l(l+1)$, $L_z \rightarrow \hbar m$. Wir wissen bereits die Eigenfunktionen zu \vec{L}^2 und L_z , diese sind durch die Kugelflächenfunktionen gegeben $Y_l^m(\theta, \phi)$. Somit ist die durch die Kugelflächenfunktionen gegebene Winkelverteilung eine Lösung des Winkelteils der Gleichung und lässt sich durch separation in Radial und winkelteil darstellen als

$$\phi(\vec{r}) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$$

Nach dem Anwenden des Hamiltonoperators kann durch den Winkelanteil geteilt werden da dieser nach Anwendung von \vec{L}^2 mit allem Vertauscht, damit ergibt sich die DGL für die Radialgleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{k,l}(r) = E_{k,l} R_{k,l}(r)$$

Durch Substitution von $R_{k,l}(r) = \frac{1}{r} u_{k,l}(r)$ und multiplikation mit r erhält man

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \underbrace{\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}}_{V_{eff}(r)} + V(r) \right] u_{k,l}(r) = E_{k,l} u_{k,l}(r)$$

Bedingung: $u_{k,l}(0) = 0$ Lösung der Radialgleichung durch Potenzreihenansatz:

$$u_{k,l}(r) = r^s \sum_{q=0}^{\infty} c_q r^q$$

Energieeigenwerte

$$E_n = -\frac{1}{n^2} E_1 \approx -13,6 eV \frac{1}{n^2}$$

Warum ist \vec{L}^2 eine Erhaltungsgröße?

Die Kraft wirkt nur entlang dem Vektor zwischen den zwei Teilchen, da sie sich anziehen und keine weiteren Kräfte wirken. Damit ist das Drehmoment $\vec{M} = \vec{r} \times \vec{F} = 0$ und somit der Drehimpuls erhalten.

Starck Effekt

Störung des Hamiltonoperators des Wasserstoffatoms durch einen Term linear in der elektrischen Feldstärke E

$$H = H_0 + q|\vec{E}|z$$

Die Energiekorrektur erster Ordnung ist durch den Erwartungswert des Störterms mit den Eigenzuständen von H_0 gegeben.

$$E_1^{(100)} = \langle 100|z|100 \rangle = 0$$

Betrachten wir den Grundzustand ist die erste Korrektur null da der Grundzustand positive Parität aufweist und z negative.

Es gibt aber Terme zweiter Ordnung die nicht verschwinden (quadratischer Starck Effekt).

$$E_2^{(100)} \approx -1,48a_B^3|\vec{E}|^2$$

Hamilton im Elektromagnetischen Feld: Kanonische Impulse aus Lagrangegleichung

Um den Hamilton im EM Feld zu erhalten werden die kinetischen durch die kanonischen Impulse ersetzt, diese erhält man aus der Lagrangegleichung

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= T - V = \frac{m}{2}v^2 - q\Phi + qv\vec{A} - V(\vec{r}) \\ p_{kan} &= \frac{\partial \mathbf{L}}{v} = mv - q\vec{A} = p + q\vec{A} \\ H &= \frac{1}{2m_e}[p - q\vec{A}]^2 + V = H_0 + H_1 + H_2 \\ H_0 &= \frac{p^2}{2m} + V \\ H_1(param) &= -\frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \cdot \vec{B} \\ H_2(diam) &= \frac{q^2 \vec{B}^2}{8m} \vec{R}_\perp^2 \\ \vec{R}_\perp^2 &= \vec{R}^2 - \frac{(\vec{R} \cdot \vec{B})^2}{\vec{B}^2} \end{aligned}$$

Die Energieaufspaltung durch den Paramagnetischen Term H_1 ergibt:

$$\frac{\Delta E_1}{h} \approx \frac{1}{h} \mu_B B = \frac{\omega_L}{2\pi}$$

Wobei $\omega_L = -\frac{qB}{2\mu}$ die Larmor Frequenz ist.

Der Zeemaneffekt beschreibt die Abspaltung der Energielinien durch Kopplung eines Magnetischen Felds an den Drehimpuls des Atoms, daher der Paramagnetische Teil.

Der Diamagnetische Term H_2 ergibt:

$$\Delta E_2 \approx \frac{q^2 B^2}{m} a_0^2$$

Myonatom - Energie größer $E \rightarrow \approx 200 \cdot E_0$, Radius Kleiner $r \rightarrow \approx \frac{r_0}{200}$
Wasserstoffatom im EM-Feld: Paramagnetischer und Diamagnetischer Term!

2.4 Drehimpulse

Eigenwertgleichungen und Eigenschaften von quantenmechanischen Drehimpulsen

$$\begin{aligned}
 [J_a, J_b] &= i\hbar\epsilon_{abc}J_c \\
 [\vec{J}^2, \vec{J}] &= 0 \\
 \vec{J}^2|l, m\rangle &= \hbar^2l(l+1)|l, m\rangle \\
 J_z|l, m\rangle &= \hbar m|l, m\rangle \\
 J_{\pm} &= J_x \pm iJ_y \\
 J_+|l, m\rangle &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}|l, m+1\rangle \\
 J_-|l, m\rangle &= \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}|l, m-1\rangle
 \end{aligned}$$

Addition von Drehimpulsen: **Clebsch-Gordan-Koeffizienten**

Hat man zwei nicht über den Spin wechselwirkende Teilchen 1 und 2 so hat man den vSkO mit $\vec{S}_1^2, S_{1,z}, \vec{S}_2^2, S_{2,z}$. Man kann nun in die Basis des Gesamtdrehimpulses J wechseln mit

$$\begin{aligned}
 \vec{J} &= \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \\
 [J_a, J_b] &= i\hbar\epsilon_{abc}J_c \\
 \vec{J}^2|J, M\rangle &= \hbar^2J(J+1)|J, M\rangle \\
 J_z|J, M\rangle &= \hbar m|J, M\rangle
 \end{aligned}$$

Der vSkO ist nun $\vec{J}^2, J_z, \vec{S}_1^2, \vec{S}_2^2$. Damit ergibt sich der Zustand:

$$|J, M, l_1, l_2\rangle = \sum_{m_1, m_2} |l_1, m_1, l_2, m_2\rangle \underbrace{\langle l_1, m_1, l_2, m_2 | J, M, l_1, l_2 \rangle}_{\text{Clebsch-Gordan-Koeffizienten}}$$

Bedingungen an J und M dass die Koeffizienten ungleich null sind:

$$j_1 + j_2 \geq J \geq |j_1 - j_2| \qquad M = m_1 + m_2$$

Vorgehen zu Bestimmung der CGK ist:

Für $m_1 = l_1$ und $m_2 = l_2$ ist $\langle l_1, l_1, l_2, l_2 | J, M, l_1, l_2 \rangle = 1$

Dann können durch Anwendung von $J_-|J, M\rangle = \dots|J, M-1\rangle$ die weiteren Koeffizienten mit $J = l_1 + l_2$ bestimmt werden. Für niedrigere Werte von J muss ein orthogonaler Zustand konstruiert werden und dann gleich vorgegangen werden.

To Do: Durchrechnen für zwei spin $\frac{1}{2}$

2.4.1 Stationäre Störungstheorie

In der stationären Störungstheorie wird der diagonalisierte Hamiltonoperator durch einen kleinen konstanten nichtdiagonalterm gestört

$$H = H_0 + \lambda H_1 \qquad \lambda \in \mathbb{R}$$

Man setzt nun die eigenzustände als Potenzreihe von λ an, wobei $|n_0\rangle$ und E_n^0 die Eigenwerte des ungestörten Hamilton Operators H_0 sind

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n_0\rangle + \lambda|n_1\rangle + \lambda^2|n_2\rangle + \dots \\ E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \end{aligned}$$

Konvergiert diese Reihe so erhält man den Eigenzustand $|n\rangle$ zum gestörten Hamiltonian H mit der Energie E_n .

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$(H_0 + \lambda H_1)(|n_0\rangle + \lambda|n_1\rangle + \lambda^2|n_2\rangle + \dots) = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)(|n_0\rangle + \lambda|n_1\rangle + \lambda^2|n_2\rangle + \dots)$$

Koeffizientenvergleich der Potenzen von λ liefert

$$\begin{aligned} H_0|n_0\rangle &= E_n^0|n_0\rangle \\ H_1|n_0\rangle + H_0|n_1\rangle &= E_n^1|n_0\rangle + E_n^0|n_1\rangle \\ H_0|n_2\rangle + H_1|n_1\rangle &= E_n^0|n_2\rangle + E_n^1|n_1\rangle + E_n^2|n_0\rangle \\ &\text{usw...} \end{aligned}$$

Es gilt $\langle n_0|n_0\rangle = 1$ wegen der normierung der ursprünglichen Lösung des ungestörten Hamilton. $|n\rangle$ soll normiert sein daraus folgt

$$\begin{aligned} \langle n|n\rangle &= (\langle n_0| + \lambda\langle n_1| + \lambda^2\langle n_2| + \dots)(|n_0\rangle + \lambda|n_1\rangle + \lambda^2|n_2\rangle + \dots) \\ \langle n_0|n_1\rangle &= \langle n_1|n_0\rangle = 0 \\ \langle n_0|n_2\rangle &= \langle n_2|n_0\rangle = -\frac{1}{2}\langle n_1|n_1\rangle \end{aligned}$$

Damit erhält man in erster Ordnung die Korrekturen

$$\begin{aligned} E_n^1 &= \langle n_0|H_1|n_0\rangle \\ |n_1\rangle &= \sum_{m(\neq n)} |m_0\rangle \frac{|\langle m_0|H_1|n_0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \end{aligned}$$

3 Theo E

Potentialstreuung

Vorraussetzungen

- Spinlose Teilchen (Strahl und Target)
- Innere Struktur wird nicht berücksichtigt, daher nur elastische Streuung
- Keine Mehrfachstreuung (dünnes Target)
- Keine Interferenz zwischen den auslaufenden Wellen der Targetteilchen. Kohärenzlänge \ll Abstand Teilchen
- Wechselwirkung hängt nur vom Abstand der Teilchen ab $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Daher vereinfacht sich das Problem zur Streuung eines einzelnen Relativteilchens mit Masse μ an einem Potential V . $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$

Bornsche Näherung: Lösung der Integralgleichung für die gestreute Funktion durch iteratives einsetzen in sich selbst ergibt die Bornsche Reihe und damit die Näherung dass die Streuamplitude mit der Fourier-Transformierten des Potentials zusammenhängt. Damit ergibt sich der differentielle Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_k^B(\theta, \phi) = \frac{\mu^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int d^3r \exp(-i\vec{K} \cdot \vec{r}) V(\vec{r}) \right|^2$$

Mit dem Streuwellenvektor $\vec{K} = \vec{k}_d - \vec{k}_i$ mit dem Wellenvektor \vec{k}_i der einfallenden Welle, und Wellenvektor \vec{k}_d der gestreuten Welle.

Partialwellenmethode: Die Wellenfunktion wird nach den Eigenwerten des Drehimpulsoperators entwickelt. Liegt ein Zentralpotential vor ($V(\vec{r}) = V(r)$) so ist der Bahndrehimpuls L eine Konstante der Bewegung. Die Wellenfunktion wird für große Abstände vom Streupotential als Überlagerung der einlaufenden ebenen Welle und der durch die Streuamplitude ($f(\theta, \phi)$) modifizierte Kugelwelle angesetzt:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) R_{l,k}(r) P_l(\cos \theta)$$

Mit den Legendre Polynomen $P_l(\cos \theta)$. Kugelsymmetrie hebt die Abhängigkeit von ϕ . $R_{l,k}$ ist Lösung der radialen Schrödingergleichung und ist eine Kombination aus der sphärischen Bessel Funktion $j_l(\rho)$ und der von-Neumann Funktion $n_l(\rho)$.

$$R_{l,k} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr)$$

Klein Gordon Gleichung

Beschreibt relativistische Spin 0 Teilchen, Invariant unter Lorentz Transformation

$$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi(x) = 0 \quad (8)$$

$$\partial_\mu \partial^\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \quad (9)$$

Lösungen:

$$\psi(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\vec{x})\right) \quad E = \pm\sqrt{c^2p^2 + m^2c^4} \quad (10)$$

Dirac Gleichung

Bedingungen:

- Relativistische Energie $E^2 = c^2p^2 + m^2c^4$
- Es existiert ein 4er-Strom mit $j^0 \propto \rho$ und ρ ist die positiv definite Wahrscheinlichkeitsdichte
- Lorentz Kovariant: Invariant unter Lorentztransformation

$$\underbrace{\left(\beta mc^2 + \frac{\hbar c}{i}\alpha^k \partial_k\right)}_{H_{Dirac}} \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (11)$$

α^k, β Matrizen

ψ N-Komponentiger Spinor

4er Spinor hat vier Wellenfunktionen als einträge. Es ist eine vierdimensionale Wellenfunktion die auch die Klein Gordon Gleichung erfüllen muss. Ist KEIN 4er Vektor und transformiert sich nicht wie ein solcher unter Lorentztransformation.

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}^+ \\ \psi_{\downarrow}^+ \\ \psi_{\uparrow}^- \\ \psi_{\downarrow}^- \end{pmatrix}$$

Mit \uparrow / \downarrow Spin up, down.

Und \pm Positiver, negativer Energie, beziehungsweise Teilchen/Antiteilchen.

Nach zweimaliger Anwendung von H ergeben sich die Matrizen

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (12)$$

σ^i sind die Pauli Matrizen

In Kovarianter Form mit $\gamma^0 \equiv \beta$ und $\gamma^k \equiv \beta\alpha^k$

$$0 = \left(-i\gamma^\mu \partial_\mu + \frac{mc}{\hbar}\right) \psi \quad (13)$$

Vierervektoren lassen sich durch die Lorentztransformation von einem Bezugssystem in ein anderes relativ dazu bewegtes Bezugssystem überführen. Ortsvektor gibt einen Punkt in der Raumzeit an.

Kontravarianter Vierervektor x^μ , $x^0 = ct$, $x^1 = x$, $x^2 = y$, $x^3 = z$

Kovarianter Vierervektor x_μ , $x = (ct, -x, -y, -z) = g_{\mu\nu}x^\nu$

Metrischer Tensor $g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

4er Impuls $p^\mu = (\frac{E}{c}, \vec{p})^T$

Lorentzskalar ist invariant unter Lorentztransformation. Zum beispiel

$$p_\mu p^\mu = -m^2 c^2$$

Dirac See:

Der Dirac See war der Ansatz für die Erklärung der Lösungen der Dirac Gleichung mit negativer Energie, bevor Antiteilchen bekannt waren. Der Dirac See beschreibt das Vakuum als unendlichen See von Teilchen mit negativer Energie. Das Positron ist damit ein 'Loch' im Dirac See, dieses Loch kann durch hereinfallen eines Elektrons unter abstrahlung von Photonen annihilieren.

Problematisch wird dieses Bild bei der Abstrahlung von Energie eines Elektrons, da dies ermöglichen würde dass das Elektron so viel Energie abstrahlt biss es eine negative energie hat, was reel nicht möglich ist. Das Modell wurde durch das Modell der Antiteilchen ersetzt.

Gefüllt bis zur negativen Fermi Energie vs unendlich????

4 Theo F

4.1 Hauptsätze der Thermodynamik

0. Hauptsatz: Temperatur

Es gibt eine intensive Zustandsgröße 'Temperatur' so dass Systeme die miteinander im Gleichgewicht sind denselben Wert der Temperatur haben.

1. Hauptsatz: Energiesatz, Äquivalenz von Wärme und Arbeit

Wir betrachten einen beliebigen thermodynamischen Prozess. Dabei werde die Wärme δQ zugeführt, vom System die Arbeit δW geleistet oder die Teilchenzahl N geändert. Alle Prozesse ändern die innere Energie.

$$dU = \delta Q - \delta W + \mu dN$$

Die innere Energie U ist eine Zustandsgröße, W und Q aber nicht (W und Q sind Prozessgrößen daher δQ und δW)!

In einem abgeschlossenen System ($dN=0$) gilt Energieerhaltung, innere Energie U wird entweder in Arbeit W umgewandelt oder als Wärme abgegeben/aufgenommen. In einem Isolierten System ($dN = dQ = 0$) kann die innere Energie nur in Arbeit umgewandelt werden. Die Gesamtenergie ist dabei erhalten.

2. Hauptsatz:

- Die Entropie eines abgeschlossenen Systems nimmt nie ab

$$dS \geq 0 \quad (14)$$

$$\text{reversibel} \rightarrow dS = 0 \quad (15)$$

$$dS = \frac{\delta Q}{T} \quad (16)$$

- Äquivalent dazu gilt: Wärme fließt spontan von der höheren zur niedrigeren Temperatur

3. Hauptsatz:

$$S(T = 0) = 0$$

Die Entropie eines Systems nimmt bei $T=0$ einen universalen Wert an (unabhängig von anderen Variablen) $S(T=0)=\text{const}$. Diese Konstante kann null gesetzt werden.

Der Entropieunterschied zwischen Zuständen die durch reversible Prozesse verbunden sind verschwindet bei $T=0$. Konsequenz: Der Absolute Nullpunkt kann nicht in einer endlichen Zahl von reversiblen Prozessen erreicht werden. (z.B. Abwechselnd Adiabatisch und Isotherm).

Folgen der Hauptsätze

Nernstsches Theorem

Der Absolute Nullpunkt ($T=0$) kann niemals durch eine Reihe von Prozessen erreicht werden, weil $T \rightarrow 0$ gilt

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$$
$$\lim_{T \rightarrow 0} dS = 0$$

Der Entropieunterschied zwischen Zuständen die durch reversible Prozesse verbunden sind verschwindet bei $T=0$. **Zustandsgrößen** beschreiben einen thermodynamischen Zustand:

Temperatur T , Teilchenzahl N , Entropie S , innere Energie U

Gase: Druck P , Volumen V

magnetische Systeme: Magnetisierung M und Magnetfeld H

Differentiale von Zustandsgrößen sind Vollständig: Das Integral $\int_A^B dF = F(B) - F(A)$ ist wegunabhängig und das Integral entlang eines geschlossenen Wegs verschwindet $\oint dF = 0$.

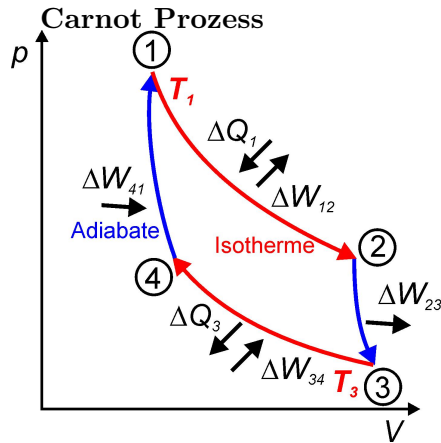
Intensiv: Zustandsgröße die sich mit der Größe des Systems nicht verändert: Temperatur, Druck

Extensiv: Zustandsgröße die mit der Größe des Systems skaliert: Teilchenzahl, Volumen, Entropie

Prozessgrößen sind physikalische Größen welche bei Zustandsänderungen auftreten und deren Integral nicht wegunabhängig ist.

Wärme Q und Arbeit W sind Prozessgrößen daher wird ihr differential als δQ und δW dargestellt.

Ein Kreisintegral einer Prozessgröße \oint verschwindet nicht, da Prozessgrößen keine vollständiges Differentiale sind und somit das Integral abhängig ist vom Weg.



Wirkungsgrad:

Kreisprozess damit gilt $\oint dU = 0$,

damit folgt aus erstem Hauptsatz $\Delta W = \Delta Q = Q_1 + Q_3 = |Q_1| - |Q_3|$

Damit kann der Wirkungsgrad berechnet werden.

$$\eta = \frac{\Delta W}{|Q_1|} = 1 - \frac{|Q_3|}{|Q_1|}$$

Die Kelvin Temperaturskala ist darüber definiert dass es keinen Prozess mit höherem Wirkungsgrad gibt als den Carnot Prozess damit gilt

$$\frac{t_1}{T_2} = \frac{|Q_1|}{|Q_2|}$$

Für reversible Prozesse gilt

$$\oint \frac{\delta Q}{T} = 0$$

4.2 Statistische Physik

Gibbs Paradoxon

In der klassischen Mechanik wird die Ununterscheidbarkeit von Teilchen nicht berücksichtigt. Verbinden zweier Volumen mit gleichem Gas bei gleichem Druck und gleicher Temperatur erhöht klassisch die Entropie.

$$S = N(c_V \ln(T) + k_B \ln(V))$$

$$S_{\text{verbunden}} = (N_1 + N_2)k_B \ln(V_1 + V_2) \neq N_1 k_B \ln(V_1) + N_2 k_B \ln(V_2) = S_1 + S_2$$

Dies wird korrigiert in dem ein Austauschterm eingeführt wird der die Ununterscheidbarkeit der quantenmechanischen Teilchen berücksichtigt. Es ergeben sich keine neuen Zustände durch das Vertauschen von Teilchen, daher wird die Zustandssumme Z durch die $N!$ Permutationen der einzelnen Teilchen geteilt.

$$dS_{\text{klassisch}} = R \ln 2 \text{ (Falsch berechnet bei ununterscheidbaren Teilchen)}$$

$$dS_{\text{quantenmech}} = 0$$

4.2.1 Klassische statistische Mechanik

Gibbs Verteilung

Wahrscheinlichkeitsdichte im Phasenraum $\rho(\vec{x}, t) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$.

$\rho(\vec{x}, t) dx$ bezeichnet die Wahrscheinlichkeit eine Realisierung des Ensembles zur Zeit t Impulse im Bereich $[p_i, p_i + dp_i]$ und Koordinaten im Bereich $[q_i, q_i + dq_i]$ hat.

$$\int d\vec{x} \rho(\vec{x}, t) = 1$$

$$\bar{A} = \int d\vec{x} A(\vec{x}, t) \rho(\vec{x}, t)$$

Wahrscheinlichkeitsverteilung entwickelt sich in der Zeit im Phasenraum wie eine strömende inkompressible Flüssigkeit:

$$\frac{d}{dt} \rho(\vec{x}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \dot{\vec{x}} \cdot \nabla \rho(\vec{x}, t) = 0$$

Liouville Gleichung:

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} = -L\rho = \{H, \rho\}}$$

$$\{H, A\} = \sum_{j=1}^{3N} \left(\frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial}{\partial q_j} A - \frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial}{\partial p_j} A \right)$$

Fundamentales Postulat der klassischen statistischen Mechanik:

Für ein abgeschlossenes System mit erhaltener Energie E dass als mikrokanonisches Ensemble bezeichnet werden kann gilt im Gleichgewicht: Alle Zustände mit $H(\vec{x}) = E$ sind gleich wahrscheinlich.

$$\rho(\vec{x}) = \frac{1}{\sum(E)} \delta(E - H(\vec{x})) = \begin{cases} \frac{1}{\sum(E)dE} & \text{für } E \leq H(x) \leq E + dE \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Ergodenhypothese:

Sagt aus dass sich thermodynamische Systeme in der Regel zufällig verhalten und alle möglichen Zustände im Phasenraum auch angenommen werden. Daher macht es keinen Unterschied ob einmal das Mittel eines Ensembles gemessen wird oder der Wert eines Teilchens über eine Zeit gemittelt wird. Damit ist der Ensemblemittelwert in der Regel gleich dem Zeitmittelwert

$$\bar{A}(t) = \langle A \rangle = \sum_i p_i A_i$$

4.2.2 Quantenmechanische statistische Mechanik

Wahrscheinlichkeit W_v dass das System in einem der Zustände $|v\rangle$ ist. Dies wird als Gemisch bezeichnet da es eine Summe der Quadrate ist und keine superposition von

Zuständen (keine Interferenz). Das Quantenstatistische Mittel einer Observablen A ist

$$\langle \bar{A} \rangle = \sum_v W_v \langle v | A | v \rangle$$

Dies lässt sich über den Dichteoperator ρ ausdrücken in der Basis $|v\rangle$ und der Basis $|n\rangle = \sum_n c_{vn} |v\rangle$

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_v W_v |v\rangle \langle v| \\ \rho_{n,n'} &= \langle n | \rho | n' \rangle = \sum_v W_v c_{v,n} c_{v,n'}^* \\ \langle \bar{A} \rangle &= \text{tr}[\rho A] \end{aligned}$$

Der Dichteoperator hat die Eigenschaften:

normiert: $\text{tr} \rho = 1$

hermitesch: $\rho^\dagger = \rho$

Positiv definit, es gilt für alle Zustände: $\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$

Beschreibt eine Dichtematrix einen reinen Zustand so wird sie zum Projektor $\rho = |\psi\rangle \langle \psi| = P_{|\psi\rangle}$

Ändern sich die klassischen Wahrscheinlichkeiten W_v nicht zeitlich so erhält man nach einsetzen in die zeitabhängige Schrödinger Gleichung die **quantenmechanische Liouville-Gleichung** oder **von Neumann-Gleichung**

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [H, \rho]}$$

Ist H zeitunabhängig so wird die Liouville-Gleichung gelöst von

$$\rho(t) = e^{-iHt/\hbar} \rho(0) e^{iHt/\hbar}$$

Eine stationäre Lösung tritt auf wenn ρ mit dem Hamiltonoperator vertauscht, das bedeutet ρ und H haben eine gemeinsame Basis und ρ ist diagonal in der Basis der Energiezustände. (Gleichgewicht: Stationäre Lösung)

Fundamentales Postulat in der Quantenmechanik

Für ein mikrokanonisches Ensemble ist die Energie erhalten und im Gleichgewicht ist die Dichtematrix diagonal in der Basis $|n\rangle$ die den Hamiltonoperator diagonalisiert. Alle Zustände mit Energie E_n im Bereich zwischen E und E + dE sind gleich wahrscheinlich

$$\rho_{n,n} = W_n = \begin{cases} \text{const} & E \leq E_n \leq E + dE \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Entropie:

$$S = -k_B \text{tr}[\rho \ln \rho] \quad \text{quantenmechanisch}$$

$$S = -k_B \int d\vec{x} \rho(\vec{x}) \ln \rho(\vec{x}) \quad \text{klassisch}$$

Virialsatz:

Beziehung zwischen arithmetischem Mittel der kinetischen Energie T und zeitlichem Mittel der potentiellen Energie. $H = H_{kin} + U(x)$. Jeder Freiheitsgrad liefert $\frac{1}{2}k_B T$ an kinetischer Energie.

$$\langle H_{kin} \rangle = \left\langle \sum_i \frac{p_i^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2} \sum_i \left\langle \vec{x}_i \frac{\partial U}{\partial \vec{x}_i} \right\rangle$$

'Herleitung' Pauli Verbot

Für die Wellenfunktion von zwei Fermi (Spin $\frac{1}{2}$) Teilchen gilt die Vertauschungsrelation.

$$\psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$$

Wären nun beide Teilchen im gleichen Zustand x_1 so würde gelten

$$\begin{aligned} \psi(x_1, x_1) &= -\psi(x_1, x_1) \\ \psi(x_1, x_1) &= 0 \end{aligned}$$

Daher können zwei Fermi Teilchen nicht im genau gleichen Zustand sein.

4.2.3 Ideale Gase

Bosonen:

Kondensieren bei $T = 0$ alle im Grundzustand: Bose Einstein Kondensation

$$\langle n_\lambda \rangle = \frac{1}{\exp(\frac{\epsilon_\lambda - \mu}{k_B T}) - 1}$$

Fermionen:

Pauli Prinzip, füllen alle Zustände bis Fermi Niveau

$$\langle n_\lambda \rangle = \frac{1}{\exp(\frac{\epsilon_\lambda - \mu}{k_B T}) + 1}$$

Für große Energien ϵ gehen die Verteilungen in die Maxwell-Boltzman-Verteilung über.