Theoretische Physik V : Quantenmechanik II

VL WS 2014/15 Eckehard Schöll

Masterstudiengang Physik : Pflicht 11 ECTS

Di + Do 8:15 – 10:00 EW 203

Lit.:
U. Scherz : Quantenmechanik
E. Fick : Einf. i. Grundlagen der QM
F. Schwabl : QM Bd. I + II
W. Nolting : Grundkurs Theor. Phys. Bd. 1+2
H. Mitter : Quantentheorie

Schwerpunkte : Vielteilchenquantenmechanik
Näherungsverfahren
Streutheorie
Relativist. Quantentheorie

1. Formalisierung der Quantenmechanik

klass. Mechanik : deterministisch (Ort $\underline{x}$, Impuls $\underline{p}$)

Quantenmechanik : probabilistisch (Wahrscheinlichkeitsaussagen)

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte,
ein Elektron am Ort $\underline{r}$ zur Zeit t zu finden:

$|\psi(\underline{r},t)|^2$, $\psi(\underline{r},t) \in \mathbb{C}$ Wellenfkt.

$\psi(\underline{r},t)$ ist Lösung der Schrödingergl.

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$, $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\underline{r})$ Ham. op.

Heisenberg'sche Unschärferelation.

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

$\Delta x = \sqrt{\langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle}$ Orts-
$\Delta p = \sqrt{\langle(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle)^2\rangle}$ Impuls-
Unschärfe

Erwartungswert einer Observablen A

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\underline{r},t)\, A\, \psi(\underline{r},t)\, d^3r$$ Mittelung über viele Messungen

<u>qm. Zustand</u> : Def. durch <u>Messung</u> eines Satzes vertauschbarer Observablen (Maximalmessung)

QM = Theorie der Zustände u. Observablen (z.B. Energie H, Impuls $\underline{p}$, Drehimpuls $\underline{L}$, ...)

<u>Kontinuitätsgl. der Wahrscheinlichkeit</u> :

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 + \underline{\nabla}\cdot\underline{j} = 0$$

W.stromdichte $\underline{j}(\underline{r},t) = \frac{1}{2m}\{\psi^*\hat{\underline{p}}\psi + \psi(\hat{\underline{p}}\psi)^*\}$

$$= \frac{\hbar}{2im}\{\psi^*\underline{\nabla}\psi - \psi\underline{\nabla}\psi^*\}$$

Verallg. auf Magnetfeld (Pot. $\underline{A}$):

$$\hat{\underline{p}}_{kin} = \hat{\underline{p}} - e\underline{A}$$ <u>kinet.</u> Impuls

kanon. konj. Imp. $\hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}$

$$\underline{j} = \frac{1}{2m}\{\psi^*\hat{\underline{p}}_{kin}\psi + \psi(\hat{\underline{p}}_{kin}\psi)^*\}$$

Ham.op. $\hat{H} = \frac{\hat{\underline{p}}_{kin}^2}{2m} + V(\underline{r})$

stat. Zustände : $\psi(\underline{r},t) = \varphi(\underline{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$

mit $\hat{H}\varphi = E\varphi$ zeit<u>un</u>abh. Schrödingergl.

Energie-Eigenwerte E des Ham.op.

(mögliche Messwerte : diskret oder kontinuierl.)

1.1. Zustandsvektoren im Hilbertraum

abstrakter Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ Hilbertraum

Dirac-ket

Wellenmechanik (Schrödinger) und Matrizenmechanik (Heisenberg) sind spezielle Darstellungen dieser Zustandsmechanik

z.B. Ortsdarstellung $\psi(\underline{r},t)$ (Wellenfkt.)

Observable $\longrightarrow$ Operator $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

z.B. Impulsop. in Ortsdarst.

$$\hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}$$

Messwert einer Messung $\longrightarrow$ Eigenwert des Op.

z.B. $\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle$

Impuls-Eigenzustand $|p\rangle$

in Ortsdarstellung $\frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}\psi_p(\underline{r}) = \underline{p}\,\psi_p(\underline{r})$ lin. Dgl. 1. Ordn.

Lösung $\psi_p(\underline{r}) = c\,e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$ ebene Welle

(Normierung $c = (2\pi\hbar)^{-3/2}$) $|\,|\,|\!\longrightarrow \underline{p}$

Eigenwert $\underline{p} = \hbar\underline{k}$ $\quad\underline{k}$ Wellenvektor

Zusammenhang mit abstrakten Zustandsvektoren:

$$\boxed{\psi_p(\underline{r}) = \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle = c\,e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}} \in \mathbb{C}$$

Projektion von $|\underline{p}\rangle$ auf $\underline{r}$-Darstellung

allg.: Ortsdarstellung $\psi(\underline{r}) := \langle \underline{r} | \psi \rangle$ $\quad\underline{r}$-Basis

analog Impulsdarstellung $\tilde{\psi}(\underline{p}) := \langle \underline{p} | \psi \rangle$ $\quad\underline{p}$-Basis

Zus.hang zwischen Orts- u. Impulsdarstellung:

Basis = vollständiges Orthonormalsystem

Darstellung = Entwicklung nach einer Basis:

$$\boxed{|\psi\rangle = \int d^3p\, |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}|\psi\rangle = \int d^3r\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\psi\rangle} \quad (*)$$

analog zur Entw. des Vektors $|a\rangle \in \mathbb{R}^n$ nach Basisvektoren $|\underline{e}_j\rangle$ oder $|\underline{\tilde{e}}_j\rangle$:

$$|a\rangle = \sum_{j=1}^{n} |\underline{e}_j\rangle\langle\underline{e}_j|\underline{a}\rangle = \sum_{j=1}^{n} |\underline{\tilde{e}}_j\rangle\langle\underline{\tilde{e}}_j|\underline{a}\rangle$$

Also

$$\underbrace{\langle\underline{r}|\psi\rangle}_{\psi(\underline{r})} = \int d^3p\, \langle\underline{r}|\underline{p}\rangle\underbrace{\langle\underline{p}|\psi\rangle}_{\tilde{\psi}(\underline{p})} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3p\, \tilde{\psi}(\underline{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

$$\underbrace{\langle\underline{p}|\psi\rangle}_{\tilde{\psi}(\underline{p})} = \int d^3r\, \underbrace{\langle\underline{p}|\underline{r}\rangle}_{\langle\underline{r}|\underline{p}\rangle^*}\underbrace{\langle\underline{r}|\psi\rangle}_{\psi(\underline{r})} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r\, \psi(\underline{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}\underline{p}\cdot\underline{r}}$$

<u>Fourier-Transf.</u> ! $\qquad \underline{p} = \hbar\underline{k}\,, \quad \tilde{\psi}(\underline{p}) = \hbar^{-3/2}\phi(\underline{k})$

$$\psi(\underline{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3k\, \phi(\underline{k})\, e^{i\underline{k}\cdot\underline{r}}$$

$$\phi(\underline{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3r\, \psi(\underline{r})\, e^{-i\underline{k}\cdot\underline{r}}$$

(*) $\Rightarrow$ <u>Vollständigkeits-Relation</u>

$$\boxed{\int d^3p\, \underbrace{|\underline{p}\rangle\langle\underline{p}|}_{\text{Projektor}} = \int d^3r\, |\underline{r}\rangle\langle\underline{r}| = \mathbb{1}}$$

<u>Hilbertraum</u>

Skalarprodukt:
$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle \overset{\mathbb{1}}{=} \int d^3r\, \langle\psi_1|\underline{r}\rangle\langle\underline{r}|\psi_2\rangle = \int d^3r\, \psi_1^*(\underline{r})\psi_2(\underline{r})$$

$$= \int d^3p \, \tilde{\psi}_1(\underline{p})^* \, \tilde{\psi}_2(\underline{p})$$

$$\|\psi\| = \left[\langle\psi|\psi\rangle\right]^{1/2} = \left[\int d^3r \, |\psi(\underline{r})|^2\right]^{1/2}$$

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3) = \left\{ \psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C} \;\middle|\; \int_{\mathbb{R}^3} d^3r \, |\psi(\underline{r})|^2 < \infty \right\}$$

Raum der quadratintegrablen Funktionen!

NB: Linearität des Vektorraumes

$\Longrightarrow$ Superpositionsprinzip für Wellenfkt.en