Theoretische Physik V: Quantenmech. II

VL WS 2009/10 E. Schöll, K. Lüdge

Masterstudiengang Physik: Pflicht 11 ECTS

Di + Do 8:30 – 10:00 EW 203

Lit.:

U. Scherz: Quantenmechanik

E. Fick: Einf. in Grundlagen der QM

F. Schwabl: QM Bd. I + II

W. Nolting: Grundkurs Theor. Phys. Bd 1+2

A. Messiah: QM Bd. 1+2

H. Mitter: Quantentheorie

<u>Schwerpunkte</u>: Vielteilchenquantenmechanik
Näherungsverfahren
Streutheorie
Relativist. Quantentheorie

1. Formalisierung der Quantenmechanik

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

<u>Quantenmechanik</u>: 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:

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

$$\Delta x = \sqrt{\langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle} \quad \text{Orts-}$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle)^2\rangle} \quad \text{Impuls-}$$

Unschärfe

Erwartungswert einer Observablen A

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

Mittelung über viele Messungen

qm. Zustand : Def. durch Messung eines Satzes vertauschbarer Observablen (Maximalmessung)

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

Kontinuitätsgl. der Wahrscheinlichkeit:

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

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

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

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

$$\hat{\underline{p}}_{kin} = \hat{\underline{p}} - e\underline{A} \qquad \text{kinet. Impuls}$$

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

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

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 $\hat{H}\varphi = E\varphi$ zeitunabh. Schrödingergl.

Energie-Eigenwerte E des Ham. op.
(mögliche Messwerte: diskret oder kontin.)

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 $\longrightarrow$ Operatoren $\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$

z.B. Impulsop. in Ortsdarst.

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

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 $c = (2\pi\hbar)^{-3/2}$) $||| \mapsto \underline{p}$

Eigenwert $\underline{p} = \hbar \underline{k}$, $\underline{k}$ 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 $\boxed{\psi(\underline{r}) := \langle \underline{r} | \psi \rangle}$ $\underline{r}$-Basis

analog Impulsdarstell. $\boxed{\tilde{\psi}(\underline{p}) := \langle \underline{p} | \psi \rangle}$ $\underline{p}$-Basis

Zus.hang zwischen <u>Orts- u. Impulsdarstellung</u>:

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 $|\tilde{\underline{e}}_j\rangle$:

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

Also

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

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

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

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

(*) $\Rightarrow$ Vollständigkeits-Relation

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

vgl. $\sum_{j=1}^{n} \overset{\text{Projektor}}{|\underline{e}_j\rangle\langle\underline{e}_j|} = \underline{1}$

Hilbertraum

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

$$= \int d^3r\, \psi_1^*(\underline{r})\,\psi_2(\underline{r})$$

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

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

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

Raum der quadratintegrablen Funktionen!

NB: Linearität des Vektorraumes $\Rightarrow$ Superpos.prinzip für Wellenfkt.en