

Vorlesung Quantenmechanik II

Dozentin:
Sabine Klapp

Assistenten: Alexander Gmele
Matthias Selig
Ame Zentgraf

VL-Zeiten: Di 8¹⁵-9¹⁵ EW 203
Do " " EW 203

Übungsfortschritt: Beginn 2. VL-Werkp

Anmeldung bei Moses bis Mi, 16.10.19) 18⁰⁰ (!!!)

Ausgabe der Übungszeitel: Do. in der VL (erste Zeitel: 17.10.19)

Abgabe " " Do. zwei Wochen danach
im Briefkasten ER-Gebäude
bis spätestens 12⁰⁰

Voraussetzung: Abgabe in 3er Gruppen

Schwerpunkte: $\leq 50\%$ der Punkte Übungszeitel
Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Übungen!

Schwerpunkte der VL Quantenmechanik II

• Relativistische Quantentheorie

bisher: QM für nicht-relativistischen Grenzfall ($v/c \ll 1$)
Schrödinger-Gleichung, Spin nur postuliert (im Kontext Wasserstoffatom)

jetzt: Relativistische Familie
Klein-Gordon-Gleichung, Dirac-Gleichung und Spin

(Viernotation, spezielle Relativitätstheorie)

→ Erklärung der Feinstruktur des Wasserstoffatoms, Spin-Bahn-Kopplung

• Vielteilchen-Quantenmechanik

- Beschreibung ^{von} Systemen identischer Teilchen: Fermionen (Pauli-Prinzip)
Bosonen (Bose-Einstein-Kondensation)
- Formalismus der 2. Quantisierung (Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren)
- Näherungsmethoden für wechselwirkende Vielteilchensysteme
(Hartree-Fock-Näherung, Austausch-Wechselwirkung)

• Streutheorie

- Streuung von Teilchen an anderen Teilchen oder an Materie
→ Rückschlüsse über Wechselwirkungen zwischen den Streupartnern

Lippmann-Schwinger-Gleichung

• Licht-Materie-Wechselwirkung

Quantisierung elektromagnetischer Felder, Wechselwirkung mit geladenen quantenmechanischen Teilchen
(Verbindung Quantenmechanik und Elektrodynamik)

0. Wiederholung von Elementen der Einführung in die QM

a) Beschreibung des Zustandes eines Systems (hier: Einteilchensystem)

(Ket-) Vektor im Hilbertraum

$|\psi(t)\rangle$ (oft schreibt man einfach $|\psi\rangle$)

Zugehöriger bra-Vektor: $\langle\psi(t)|$

Es gibt Skalarprodukt $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ ($= \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$)
 "bra-Ket" (bracket)

normierte Zustände:
 $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

Spezielle Darstellung von Zuständen:

• Ortsdarstellung:
 $\langle \underline{r} | \psi(t) \rangle = \psi(\underline{r}, t)$ "Wellenfunktion" (i. A. komplex)
 ↳ Element der "Ortsbasis"
 $\int d\underline{r} |\underline{r}\rangle \langle \underline{r}| = \hat{1}$ Vollständigkeitsrelation
 ↳ kontinuierliche Basis
 ↳ Einheitsoperator
 Aufenthaltswahrscheinlichkeit
 $|\psi(\underline{r}, t)|^2 = \psi(\underline{r}, t) \psi^*(\underline{r}, t)$

• äquivalent: Impulsdarstellung:

$\langle \underline{p} | \psi(t) \rangle = \tilde{\psi}(\underline{p}, t)$ Impuls-Wellenfunktion
 ↳ mit $\int d\underline{p} |\underline{p}\rangle \langle \underline{p}| = \hat{1}$

Übergang zwischen den Darstellungen

$$\begin{aligned} \langle \underline{r} | \psi \rangle &= \langle \underline{r} | \hat{1} | \psi \rangle = \langle \underline{r} | \int d\underline{p} |\underline{p}\rangle \langle \underline{p}| \psi \rangle \\ \psi(\underline{r}) &= \int d\underline{p} \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle \langle \underline{p} | \psi \rangle = \\ &= \int d\underline{p} \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle \tilde{\psi}(\underline{p}) \end{aligned}$$

benutze: $\langle \underline{r} | \underline{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i \frac{1}{\hbar} \underline{p} \cdot \underline{r}}$ (Plane Welle) $(\hbar = \frac{h}{2\pi})$

$$\Rightarrow \langle \underline{n} | \psi \rangle = \psi(\underline{n}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\underline{p} \tilde{\psi}(\underline{p}) e^{i\underline{p} \cdot \underline{n}}$$

Fouriertransformation!

Anwendung Ortsdarstellung:

Skalarprodukt im Ortsraum:

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle &= \langle \psi_1 | \hat{1} | \psi_2 \rangle \\ &= \int d\underline{r} \langle \psi_1 | \underline{r} \rangle \langle \underline{r} | \psi_2 \rangle \\ &= \int d\underline{r}_1 \psi_1^*(\underline{r}_1) \psi_2(\underline{r}_1) \end{aligned}$$

Eigenwertproblem:

betrachte Operator \hat{A}

$$\hat{A} |n\rangle = a_n |n\rangle$$

Eigenwerte
Eigenzustände (EZ)

diskretes Eigenwertproblem $\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}$

vollständigkeitsrelation:

(EZ bilden diskrete Basis)

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$$

(typischerweise interessiert man sich für hermitesche Operatoren \hat{A}
Eigenwerte reell! $(\hat{A}^\dagger = \hat{A})$
s. später

Entwicklung eines beliebigen Zustands $|\psi\rangle$ in Eigenzuständen

$$|\psi\rangle = \hat{1} |\psi\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{c_n \text{ Koeffizienten}} = \sum_n c_n |n\rangle$$

b) Messungen

Messe eine Observable \hat{A} im Zustand $|\psi\rangle$ normiert

- mögliche Messwert bei einer Einzelmessung: Eigenwerte a_n

(denn Observable \hat{A} hermitescher Operator)

- viele Messungen: jedes a_n auf mit Wahrscheinlichkeit $|c_n|^2$

betrachte dazu Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n \sum_{n'} \langle \psi | n \rangle \underbrace{\langle n | \hat{A} | n' \rangle}_{\frac{a_n \delta_{nn'}}{a_n \delta_{nn'}}} \langle n' | \psi \rangle \\ \text{Erwartungswert bei vielen Messungen mit} & \\ \text{identisch präparierte Ausgangszuständen} & \\ &= \sum_n a_n \frac{\langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle}{|c_n|^2} \end{aligned}$$

- Durch die Messung geht $|\psi\rangle$ in den jeweilige Eigenzustand über
(System wird durch die Messung beeinflusst!)

- Schwankungen:

$$\begin{aligned} \langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle &= \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle \quad \text{mit } \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \\ &= \dots = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \end{aligned}$$

verschwindet, falls $|\psi\rangle$ einem Eigenzustand entspricht

Heisenberg'sche Unschärferelation

Messung verschiedener Observablen \hat{A}, \hat{B}

$$\underbrace{\Delta A \Delta B}_{\sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle}} \geq \frac{1}{2} \cdot \underbrace{|\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|}_{\text{Kommutator}} \quad \text{Heisenberg'sche Unschärferelation}$$

bekanntes Beispiel: $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$

Orts-Impuls-Unschärfe
(in einer Dimension)

c) Einiges zu Operatoren

quantenmechanische Observablen \rightarrow ^{lineare} Operatoren im Hilbertraum

adjungierter Operator:

$$\text{Sei } \hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle \iff \langle \psi | \hat{A}^\dagger = \langle \phi |$$

Def. des adjungierten Operators über Matrixelement

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A}^\dagger \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

speziell: hermitescher (selbstadjungierter) Operator: $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$

$$\Rightarrow \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{A} \psi_1 \rangle^*$$

speziell: $|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle$

$$\langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_1 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A} \psi_1 \rangle^*$$

Erwartungswert ist reell

↳ eines hermiteschen Operators!

Unitäre Operatoren

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{1}$$

d) Dynamik

zeitabhängige Schrödingergleichung:

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

Falls \hat{H} zeitunabhängig: Formale Lösung über Potenzreihe

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi(0)\rangle \quad \text{Ansatz } t=0$$

$$= \hat{U}(t, 0) |\psi(0)\rangle$$

$$\text{mit } \hat{U}(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

$$= \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{1}{\nu!} \left(-\frac{i}{\hbar} t\right)^{\nu} \hat{H}^{\nu}$$

Zeitentwicklungsoperator (unitär!)

\hat{H} zeitunabhängig: Exponentialfunktion

$$\text{adjungierte SG: } \langle \psi(t) | \hat{H} = \langle \hat{H} \psi(t) | = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) |$$

Zeitunabhängige SG: nicht zeitabhängig

$$\text{Produkt-Ansatz } |\psi(t)\rangle = f(t) |\varphi\rangle \quad \text{mit } f(t) = e^{-\frac{iE}{\hbar} t}$$

$$\text{aus SG: } \boxed{\hat{H} |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle}$$

Ehrenfestgleichung (für die Dynamik von Erwartungswerten)

$$\text{sei } \langle \hat{A} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \frac{\hbar}{i} \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$$

Folgerung: falls $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ und $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$

$$\Rightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = 0 \quad \hat{A} \text{ ist Erhaltungsgröße !!}$$

Analogie zu Poisson-Klammer in der klass. Mechanik