Vorlesung Quantenmechanik II

Dozentin:
Sabine Klapp

Assistenten: Alexander Carmele
Malte Selig
Anne Zeitler

VL-Zeiten: Di 8^{15} – 9^{45} EW 203
Do " " EW 203

Übungsbetrieb: Beginn 2. VL-Woche

Anmeldung bei Moses bis Mi, 16.10.19, 18^{00} (!!!)

Ausgabe der Übungszettel: Do. in der VL (erster Zettel: 17.10.19)
Abgabe " " Do. zwei Wochen danach
im Briefkasten ER-Gebäude
bis spätestens $\underline{12^{00}}$

Voraussichtlich Abgabe in 3-er Gruppen

Scheinkriterien: 50% der Punkte Übungszettel
Regelmäßige und aktive Teilnahme an den Übungen!

Schwerpunkte der VL Quantenmechanik II

• Relativistische Quantentheorie

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

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

(Vierernotation, spezielle Relativitätstheorie)

$\Rightarrow$ Erklärung der Feinstruktur des Wasserstoffatoms, Spin-Bahn-Kopplung

• Vielteilchen-Quantenmechanik

- Beschreibung von Systemen identischer Teilchen: Fermionen (Pauli-Prinzip)
  Bosonen (Bosonenkondensation)
- 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
  $\rightarrow$ Rückschlüsse über Wechselwirkungen zwischen den Streupartnern

Lippmann-Schwinger-Gleichung

• Licht-Materie-Wechselwirkung

Quantisierung elektromagnetischer Felder, Wechselwirkung mit geladenen quantenmechan. 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

$$|\psi(t)\rangle \quad \text{(oft schreibt man einfach } |\psi\rangle\text{)}$$

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

Es gibt Skalarprodukt $\underbrace{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle}_{\text{"bra-ket" (bracket)}}$ $\left(= \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^* \right)$

normierte Zustände:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Spezielle Darstellungen von Zuständen.

• Ortsdarstellung:

$$\langle \underline{r} | \psi(t) \rangle = \psi(\underline{r}, t)$$

Projektion

„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.

$$\underbrace{\langle \underline{r} | \psi \rangle}_{\psi(\underline{r})} = \langle \underline{r} | \hat{1} | \psi \rangle = \langle \underline{r} | \overbrace{\int d\underline{p}\, |\underline{p}\rangle\langle\underline{p}|}^{\hat{1}} \psi \rangle$$

$$= \int d\underline{p}\, \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle \langle \underline{p} | \psi \rangle =$$

$$= \int d\underline{p}\, \langle \underline{r} | \underline{p} \rangle\, \tilde{\psi}(\underline{p})$$

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

ebene Welle

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

Fouriertransformation !

Anwendung Ortsdarstellung:
Skalarprodukt im Ortsraum:

$$\langle \psi_1|\psi_2\rangle = \langle \psi_1|\hat{1}|\psi_2\rangle$$

$$= \int d\underline{r}\ \langle \psi_1|\underline{r}\rangle\langle \underline{r}|\psi_2\rangle$$

$$= \int d\underline{r}_1\ \psi_1^*(\underline{r})\,\psi_2(\underline{r})$$

Eigenwertproblem:

betrachte Operator $\hat{A}$

$$\hat{A}|n\rangle = \underbrace{a_n}_{\text{Eigenwerte}} \underbrace{|n\rangle}_{\text{Eigenzustände (EZ)}}$$

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 ! $(\hat{A}^+ = \hat{A})$
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 Meßwerte bei einer Einzelmessung: Eigenwerte a_n

(daher Observable $\hat{=}$ hermitescher Operator)

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

betrachte dazu Erwartungswert

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1}|\psi\rangle = \sum_n\sum_{n'}\langle\psi|n\rangle\langle n|\underbrace{\hat{A}|n'\rangle}_{a_{n'}|n'\rangle}\rangle\langle n'|\psi\rangle$$

Erwartungswert bei vielen Messungen mit identisch präparierten Ausgangszuständen

$$\underbrace{}_{a_{n'}\delta_{nn'}}$$

$$= \sum_n a_n \underbrace{\langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle}_{|c_n|^2}$$

– Durch die Messung geht $|\psi\rangle$ in den jeweiligen Eigenzustand über

(System wird durch die Messung beeinflusst!)

– Schwankungen:

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

$$= \ldots = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2$$

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

Heisenberg'sche Unschärferelation

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

$$\underbrace{\Delta A}_{\sqrt{\langle(\Delta A)^2\rangle}} \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle \underbrace{[\hat{A}, \hat{B}]}_{\text{Kommutator}} \rangle \right|$$ 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:

sei $\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle \iff \langle\psi|\hat{A}^+ = \langle\phi|$

Def. des adjungierten Operators über Matrixelement

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

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

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

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

$$\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = \mathbb{1}$$

d) Dynamik

Zeitabhängige Schrödingergleichung:

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

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

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i/\hbar \hat{H} t} |\psi(0)\rangle$$ Anfangszeit $t=0$

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

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

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

Zeitentwicklungsoperator (unitär!)

$\hat{H}$ zeitunabhängig: Exponentialfunktion

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

Zeitunabhängige SG:

Produkt-Ansatz $|\psi(t)\rangle = f(t) |\varphi\rangle$ (nicht zeitabhängig) mit $f(t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$

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

Ehrenfestgleichung (für die Dynamik von Erwartungswerten)

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 $\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}=0$

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

Analogie zu Poisson-Klammern in der klass. Mechanik