Theoretische Physik V: Quantenmechanik II

VL WS 2017/18 Eckehard Schöll

Masterstudiengang Physik: Pflicht 11 ECTS

Di + Do 8:15 – 10:00 EW 203

Lit.:

U. Scherz: Quantenmechanik

E. Fick: Einf. in die 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 (Wahrscheinlichkeits-aussagen)

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

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

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

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

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 Messung 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. $\underline{A}$):

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

↑ kanon. Impuls $\hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i}\underline{\nabla}$

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

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

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

mit $\hat{H}\varphi = E\varphi$ zeitunabh. Schrödinger-gl.

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

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 Ortsdarstellung

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

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. Ordnung

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

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

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 <u>Orts- u. Impulsdarstellung</u>:

Basis = vollständiges Orthonormalsystem

Darstellung = Entwicklung nach einer Basis:

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

analog zur Entwicklung des Vektors $|\underline{a}\rangle \in \mathbb{R}^n$ 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> $\quad \underline{p} = \hbar\underline{k}, \quad \tilde{\psi}(\underline{p}) = \hbar^{-3/2}\phi(\underline{k})$

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

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

$\circledast \Rightarrow$ <u>Vollständigkeits-Relation</u>

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

Hilbertraum

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

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

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

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

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

Raum der quadratintegrablen Funktionen!

NB: Linearität des Vektorraum

$\Rightarrow$ Superpositionsprinzip für Wellenfunktionen