

Skript zum Repetitorium

Grundlagen der Quantenmechanik

Hildegard Uecker Andreas Sorge

23. September 2012

Organisation zur Erforschung komplexer adaptiver Systeme
(or-cas)

Hildegard Uecker
Universität Wien
Mathematics and BioSciences Group
Nordbergstraße 15
1090 Wien
Österreich
hildegard.uecker@univie.ac.at

Andreas Sorge
MPI für Dynamik und Selbstorganisation
Network Dynamics Group
Bunsenstraße 10
37073 Göttingen
Deutschland
as@ds.mpg.de

Dieses Skript basiert teilweise auf Vorlagen von Christian Köhler, Maria Lenius, Rene Schulz, Christoph Solveen und Fabian Stiewe.

Dieses Skript wird gepflegt auf GitHub.
<https://github.com/or-cas/qm-grundlagen>

Organisation zur Erforschung komplexer adaptiver Systeme (or-cas) e.V.



Dieses Werk ist unter einer Creative Commons Lizenz vom Typ Namensnennung – Nicht-kommerziell – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 3.0 Deutschland zugänglich. Um eine Kopie dieser Lizenz einzusehen, konsultieren Sie <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/de/> oder wenden Sie sich brieflich an Creative Commons, 444 Castro Street, Suite 900, Mountain View, California, 94041, USA.

Vorwort

Das vorliegende Dokument entsteht als Skript für eine einwöchige Lehrveranstaltung „Repetitorium Quantenmechanik“ der Verfasser in den Sommersemestern 2011 und 2012 an der Fakultät für Physik der Universität Göttingen.

Ziel des Repetitoriums und dieses Skriptes ist, innerhalb von fünf Tagen die zentralen theoretischen Inhalte der Pflichtvorlesung „Quantenmechanik“ im Bachelorstudengang Physik zu wiederholen und anhand von Übungsaufgaben aufzuarbeiten. Unser Schwerpunkt bei Auswahl und Darstellung des Stoffes ist, insbesondere für die nicht theoretisch oder mathematisch veranlagten Teilnehmer in der gegebenen Zeit einen roten Faden durch Begriffe und vor allem Rechenmethoden der Quantenmechanik zu spinnen. Dafür müssen wir an vielen Stellen auf weiterführende Darstellungen verzichten, die über das aus unserer Sicht notwendige Verstehen zum Bestehen hinausgehen, obgleich sie Vorlesungsstoff und damit auch klausurrelevant sein mögen.

Wir danken unseren Vorgängern Christian Köhler, Maria Lenius, Rene Schulz, Christoph Solveen und Fabian Stiewe für das Erstellen und Überlassen ihrer Unterlagen für das Repetitorium Quantenmechanik, die uns wertvolle Anregungen zur Strukturierung und Ausgestaltung unseres Skripts sowie Übungsaufgaben geliefert haben. Die in diesem Skript gemachten Fehler sind natürlich unsere eigenen.

Inhaltsverzeichnis

Didaktischer Ansatz	1
Die Woche im Überblick	3
1 Montag: Wellenmechanik	5
2 Dienstag: Dirac-Formalismus	7
2.1 Der Stern-Gerlach-Versuch	7
2.1.1 Aufbau und gemessene Größen	7
2.1.2 Hintereinanderschaltung von Stern-Gerlach-Apparaturen	9
2.2 Zustände, Observable, Operatoren	10
2.2.1 Der quantenmechanische Zustand (ket-Vektoren)	10
2.2.2 Observablen	11
2.2.3 Duale Zustandsvektoren (bras) und Skalarprodukt	12
2.2.4 Operatoren	13
2.3 Physikalische Interpretation	13
2.4 Das Spin- $\frac{1}{2}$ -System und die Pauli-Matrizen	13
2.5 Die Wellenfunktion im Dirac-Formalismus	13
2.6 Die Dynamik von Quantensystemen	13
2.6.1 Zeitentwicklung der Zustände (Schrödinger-Bild)	13
2.6.2 Zeitentwicklung der Observablen (Heisenberg-Bild)	13
3 Mittwoch: Harmonischer Oszillator	15
4 Donnerstag: Drehimpuls, Zentralpotential, Wasserstoffatom	17
5 Freitag: Störungsrechnung	19
Ausblick	21

Didaktischer Ansatz

Die Woche im Überblick

1 Montag: Wellenmechanik

2 Dienstag: Dirac-Formalismus

Wir orientieren uns in diesem Kapitel im Wesentlichen an der Darstellung des Sakurai [2] und des Nolting [1].

2.1 Der Stern-Gerlach-Versuch

Der Stern-Gerlach-Versuch offenbart das Paradigma der Quantenmechanik: Zwei-Zustands-Systeme, bei denen die Quantenmechanik unserer lieb gewordenen klassischen Intuition und Interpretation am meisten widerspricht!

2.1.1 Aufbau und gemessene Größen

Im in Abbildung 2.1 gezeigten und 1922 in Frankfurt a.M. durchgeführten Experiment von Otto Stern und Walther Gerlach werden ungeladene Silberatome in einem Ofen erhitzt. Der aus dem Ofen austretende Strahl ungeladener Silberatome durchläuft ein inhomogenes Magnetfeld und trifft auf einen Schirm, auf dem die Intensitätsverteilung gemessen wird. Mit der Intensitätsverteilung messen wir die Ablenkung der Silberatome im Magnetfeld.

Frage 1. Welche Kraft wirkt auf ein ungeladenes Silberatom in einem inhomogenen Magnetfeld?

Antwort. Da sie ungeladen sind, wirkt keine Lorentzkraft. Jedes Atom besitzt allerdings ein 5s-Elektron mit einem Eigendrehimpuls, dem Spin \mathbf{S} mit dem Betrag $\frac{\hbar}{2}$. (Die Drehimpulse der anderen 46 Elektronen heben sich gegenseitig auf.) Daher weist das *Leuchtelektron* und somit das gesamte Atom ein magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu}$ parallel und proportional zum Spin auf: $\boldsymbol{\mu} \propto \mathbf{S}$. Der Betrag des magnetischen Moments des Elektrons (und damit hier des gesamten Atoms) ist das Bohrsche Magneton $\mu_B = \frac{e}{2m_e} \hbar = |\boldsymbol{\mu}|$.

Frage 2. Wie sieht die Formel der Kraft aus, die auf ein magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu}$ in einem Magnetfeld \mathbf{B} wirkt?

Antwort. Auf ein magnetisches Moment $\boldsymbol{\mu}$ im (inhomogenen) Magnetfeld \mathbf{B} wirkt eine Kraft $\mathbf{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})$. Wir nehmen an, dass sich das Magnetfeld nur in z -Richtung ändert, sodass $\mathbf{F} = (0, 0, F)$ auch nur eine Komponente in z -Richtung hat, mit dem Betrag $F = \mu \frac{\partial B}{\partial z} \cos \alpha$. Hier ist $\alpha = \angle(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{B})$ der (konstante) Winkel zwischen magnetischem Moment und Magnetfeld.

Frage 3. Was misst der Stern-Gerlach-Apparat effektiv?

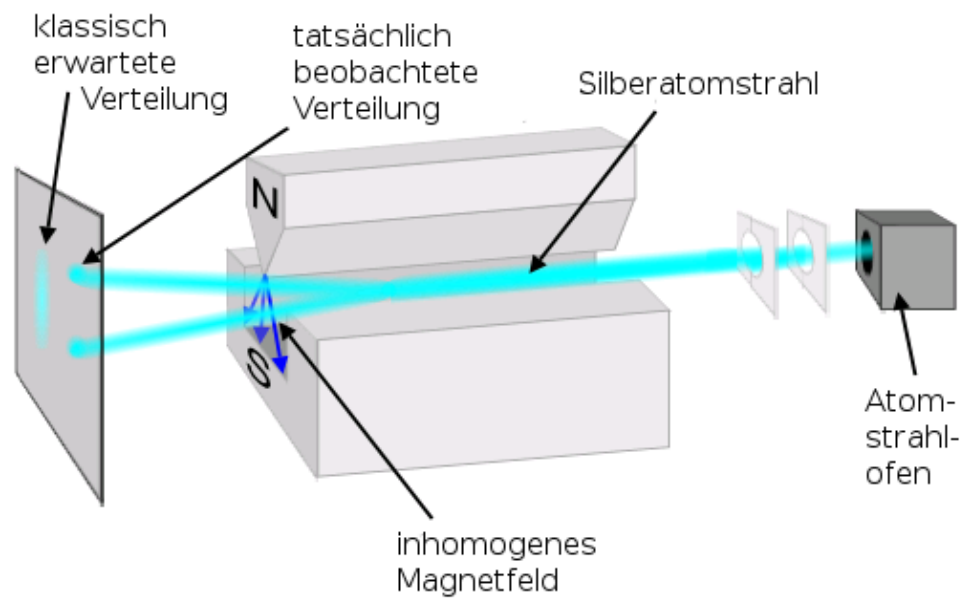


Abbildung 2.1: Der Stern-Gerlach-Versuch (1922). Grafik: Theresa Knott, Wikimedia Commons, lizenziert unter CreativeCommons-Lizenz by-sa-3.0.

2.1 Der Stern-Gerlach-Versuch

Antwort. Der Stern-Gerlach-Aufbau misst effektiv die Verteilung der Ausrichtungen $\alpha = \angle(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{B})$ der magnetischen Momente der Silberatome zum magnetischen Feld. Genauer gesagt misst der Stern-Gerlach-Aufbau die z -Komponente μ_z des magnetischen Moments jedes Silberatoms, und damit die z -Komponente S_z des Spins des Leuchtelektrons.

Die magnetischen Momente $\boldsymbol{\mu}$ der Silberatome aus dem Ofen sind vor Eintritt in das Magnetfeld zufällig in alle Richtungen orientiert.

Frage 4. Welche qualitative Intensitätsverteilung erwarten Sie daher auf dem Schirm?

Antwort. Klassisch erwarten wir eine *kontinuierliche* Verteilung zwischen den maximalen Auslenkungen, die gerade der vollständigen Ausrichtung des magnetischen Moments entlang der z -Richtung entsprechen ($\mu_z = \pm|\boldsymbol{\mu}|$). Wegen der zufälligen Orientierung der magnetischen Momente kommen auch dazwischen alle Werte vor.

Ergebnis 1. *Tatsächlich beobachten wir im Stern-Gerlach-Experiment, dass der Strahl im Apparat aufgespalten wird und wir zwei diskrete Komponenten z_+ und z_- erhalten, die gerade den vollständigen Ausrichtungen der magnetischen Momente entsprechen!*

Nach der Messung erhalten wir also zwei getrennte Teilstrahlen mit nur den beiden diskreten Werten $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ und $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ für den Spin.

Zusatzfrage. Warum richten sich nicht schon klassisch gesehen alle magnetischen Momente im Magnetfeld aus?

Antwort. Magnetische Momente von ruhenden Körpern (Stabmagnete z.B.) richten sich in der Tat am Magnetfeld aus. Elektronenspins stehen aber für eine *Eigenrotation*, und magnetische Momente $\boldsymbol{\mu}$ rotierender Körper behalten ihren Winkel zur Feldrichtung \mathbf{B} : sie richten sich nicht aus, sondern präzessieren (wie ein mechanischer Kreisel) unter dem Drehmoment $\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$ um die durch die Feldrichtung \mathbf{B} gegebene Achse. Dabei bleibt der Winkel zu dieser Achse konstant. Würden sich die Elektronenspins tatsächlich im Magnetfeld ausrichten, müssten zudem alle in Richtung des Magnetfeldes zeigen, und keiner in entgegengesetzte Richtung (wie es aber beim Stern-Gerlach-Experiment beobachtet wird).

2.1.2 Hintereinanderschaltung von Stern-Gerlach-Apparaturen

Frage 5. Was erwarten Sie (klassisch): Welche Teilstrahlen treten auf, wenn der z_- -Teilstrahl aus einem Stern-Gerlach-Apparat SG_z blockiert wird und nur der z_+ -Teilstrahl in einen weiteren Stern-Gerlach-Apparat SG_z geschickt wird?

Beobachtung. Siehe Abbildung 2.2 oben: Es ändert sich nichts. Die Spins bleiben in z_+ -Richtung ausgerichtet.

Frage 6. Der z_+ -Teilstrahl aus einer Stern-Gerlach-Apparatur SG_z wird in einer in x -Richtung angeordneten Stern-Gerlach-Apparatur SG_x wieder zur Hälfte in zwei Komponenten x_+ und x_- aufgeteilt, siehe Abbildung 2.2 Mitte. Wie erklären Sie sich dieses Ergebnis?

2 Dienstag: Dirac-Formalismus

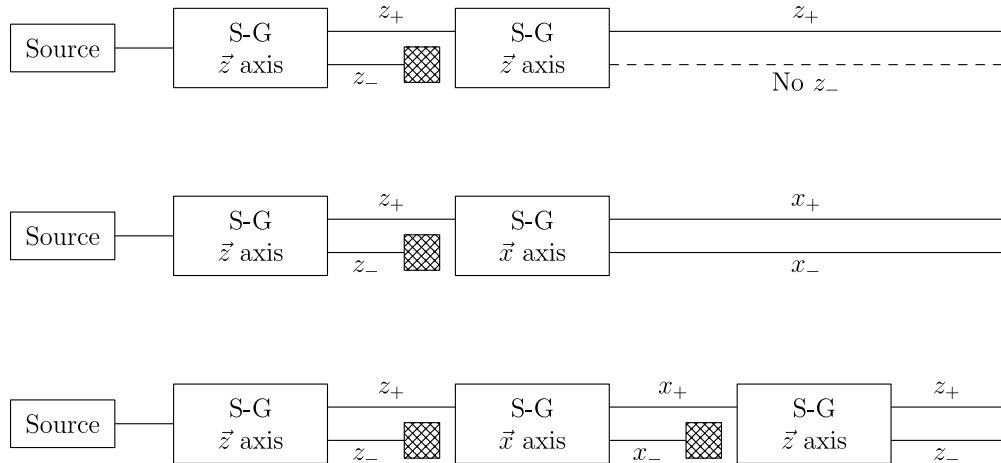


Abbildung 2.2: Sequentielle Stern-Gerlach-Versuche. Grafik: Francesco Versaci, Wikimedia Commons, Public Domain.

Man könnte klassisch vermuten, dass die Spins der Leuchtelektronen der Silberatome im z_+ -Strahl je zur Hälfte durch $S_z = +\frac{\hbar}{2}, S_x = +\frac{\hbar}{2}$ und $S_z = +\frac{\hbar}{2}, S_x = -\frac{\hbar}{2}$ bestimmt sind.

Aber:

Beobachtung. Schickt man nur den x_+ -Teilstrahl aus einer Stern-Gerlach-Apparatur SG_x , der nur aus dem z_+ -Teilstrahl einer SG_z -Apparatur gewonnen wurde, erneut durch eine SG_z -Apparatur, so spaltet sich dieser erneut je zur Hälfte in z_+ und z_- auf!

Willkommen in der Quantenmechanik! Denn:

Ergebnis 2. Die Messung von S_x durch die SG_x -Apparatur verbunden mit der Selektion des x_+ -Zustands vernichtet alle vorherige Information über den Zustand z_+ . S_z und S_x lassen sich nicht gleichzeitig bestimmen!

2.2 Zustände, Observable, Operatoren

2.2.1 Der quantenmechanische Zustand (ket-Vektoren)

Der sequentielle Stern-Gerlach-Versuch widerlegt unsere klassische Intuition: physikalische Messungen verändern nämlich im Allgemeinen den Zustand unseres Systems! Ein weiterer Widerspruch zu unserer klassischen Intuition ist, dass wir nicht alle physikalischen Größen gleichzeitig messen können. Wir können daher nicht alles gleichzeitig über einen Zustand wissen.

Wir definieren daher nach Nolting [1]:

Postulat 1. Gleichzeitige Messung eines maximalen Satzes von „verträglichen“, d.h. simultan messbaren, Eigenschaften „präpariert“ einen „reinen“ quantenmechanischen Zustand.

Beispiel. Bezüglich des Elektronenspins haben wir bereits (reine) Zustände kennengelernt: $|+\rangle$ und $|-\rangle$.

Wie können wir nun mit diesen abstrakten quantenmechanischen Zuständen rechnen, also konkrete physikalische Vorhersagen treffen?

Postulat 2. In der Quantenmechanik wird ein physikalisches System durch einen Zustandsvektor $|\alpha\rangle$ in einem komplexen Vektorraum, einem sogenannten Hilbertraum \mathcal{H} , repräsentiert. $|\alpha\rangle$ enthält die gesamte Information über den physikalischen Zustand.

Nach Dirac nennen wir einen Zustandsvektor $|\alpha\rangle$ auch *ket-Vektor* (kurz: *ket*), und den Hilbertraum *ket-Raum*.

Wie Vektoren können wir kets $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$ addieren, die Summe ist wieder ein ket:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle \in \mathcal{H}$$

Wie ein Vektor lässt sich auch ein ket mit einer komplexen Zahl $c \in \mathbb{C}$ multiplizieren, und wir erhalten wieder ein ket:

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c \in \mathcal{H}$$

Postulat 3. $|\alpha\rangle$ und $c|\alpha\rangle$ mit $c \neq 0$ sind zwar zwei verschiedene Elemente im ket-Raum \mathcal{H} , repräsentieren aber den selben physikalischen Zustand.

2.2.2 Observablen

Wie können wir nun konkret etwas über unser physikalisches System erfahren, das durch einen abstrakten Zustandsvektor repräsentiert wird? Durch messbare physikalische Größen:

Postulat 4. Messbare physikalische Größen (*Observablen*) werden durch lineare Abbildungen (*Operatoren*) auf dem ket-Raum repräsentiert.

Eine Observable A wird also repräsentiert durch den Operator $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, $\hat{A}(|\alpha\rangle) \equiv \hat{A}|\alpha\rangle \equiv A|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ ist wieder ein ket.

Konvention. Mit der Schreibweise A ist oft der Operator \hat{A} der Observablen A gemeint!

Im Allgemeinen ist das ket $\hat{A}|\alpha\rangle$ nicht gleich einer komplexen Zahl multipliziert mit $|\alpha\rangle$! Aber:

Definition 1. Die Eigenvektoren $|a_i\rangle$ der linearen Abbildung \hat{A} bezeichnen wir auch als *Eigenkets* oder *Eigenzustände* des physikalischen Systems bezüglich der Observablen A , mit den jeweiligen Eigenwerten $a_i \in \mathbb{C}$:

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$$

2 Dienstag: Dirac-Formalismus

Beispiel. Spin- $\frac{1}{2}$ -Systeme haben bezüglich der z -Richtung die Eigenvektoren $|+\rangle$ und $|-\rangle$ mit den Eigenwerten $+\frac{\hbar}{2}$ und $-\frac{\hbar}{2}$:

$$\begin{aligned}\hat{S}_z |+\rangle &= +\frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ \hat{S}_z |-\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |-\rangle \\ \text{oder auch: } \hat{S}_z |\pm\rangle &= \pm\frac{\hbar}{2} |\pm\rangle\end{aligned}$$

Postulat 5. Gegeben sei eine Observable A mit den Eigenzuständen $|a_i\rangle$. Wir können jeden Zustandsvektor $|\alpha\rangle$ nach diesen Eigenzuständen entwickeln, sprich als Summe der Eigenzustände mit komplexen Vorfaktoren $c_i \in \mathbb{C}$ schreiben:

$$|\alpha\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle \quad (2.1)$$

Wir sagen auch: Die Eigenzustände $|a_i\rangle$ spannen den Kerraum \mathcal{H} auf.

2.2.3 Duale Zustandsvektoren (bras) und Skalarprodukt

Postulat 6. Zu jedem Zustandsvektor $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ existiert ein *duales* ket $\langle\alpha| \in \mathcal{H}^*$ im Dualraum von \mathcal{H} , dem Raum \mathcal{H}^* der linearen Abbildungen $\mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$. Wir bezeichnen $\langle\alpha|$ auch als das zum ket $|\alpha\rangle$ korrespondierende *bra* (oder den *bra-Vektor*), und \mathcal{H}^* als *bra-Raum*, und schreiben:

$$|\alpha\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha| \quad (2.2)$$

Wir postulieren weiterhin, dass wir mit den korrespondierenden bras wie mit den kets rechnen können:

$$c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} c_\alpha^* \langle\alpha| + c_\beta^* \langle\beta|, \quad (2.3)$$

wobei die Vorfaktoren durch duale Korrespondenz komplex konjugiert werden!

Postulat 7. Um die Dirac'sche bra-ket-Notation zu vollenden, postulieren wir nun noch das *innere Produkt* (Skalarprodukt) $\langle\beta|\alpha\rangle \in \mathbb{C}$ eines bras $\langle\beta|$ und eines kets $|\alpha\rangle$:

$$\langle\beta|\alpha\rangle \equiv \langle\beta| \cdot |\alpha\rangle \equiv \langle\beta| (|\alpha\rangle) \in \mathbb{C} \quad (2.4)$$

Das innere Produkt habe folgende Eigenschaften:

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \quad (2.5)$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \quad \text{„positiv definit“} \quad (2.6)$$

Definition 2. Wir nennen zwei physikalische Zustände bzw. ihre repräsentierenden Zustandsvektoren $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$, *orthogonal*, wenn gilt $\langle\beta|\alpha\rangle = 0$.

Notiz.

$$\langle\beta|\alpha\rangle = 0 \Leftrightarrow \langle\alpha|\beta\rangle = 0 \quad (2.7)$$

Definition 3. Wir nennen einen Zustandsvektor $|\alpha\rangle$ *normalisiert*, wenn $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ gilt.

Konvention. Da ein physikalischer Zustand von einem ket nur bis auf einen komplexen Vorfaktor festgelegt ist, können wir festlegen, dass wir im folgenden nur noch normalisierte Zustandsvektoren betrachten.

2.2.4 Operatoren

Wenden wir uns nun wieder den Operatoren zu, und zwar ganz allgemein linearen Abbildungen auf dem Ketraum \mathcal{H} , nicht nur solchen, die physikalisch messbaren Größen (Observablen) entsprechen.

Definition 4. Zwei Operatoren \hat{X}, \hat{Y} sind gleich, $\hat{X} = \hat{Y}$, wenn $\hat{X}|\alpha\rangle = \hat{Y}|\alpha\rangle$ für alle kets $|\alpha\rangle$ gilt.

2.3 Physikalische Interpretation

2.4 Das Spin- $\frac{1}{2}$ -System und die Pauli-Matrizen

2.5 Die Wellenfunktion im Dirac-Formalismus

2.6 Die Dynamik von Quantensystemen

2.6.1 Zeitentwicklung der Zustände (Schrödinger-Bild)

2.6.2 Zeitentwicklung der Observablen (Heisenberg-Bild)

3 Mittwoch: Harmonischer Oszillator

4 Donnerstag: Drehimpuls, Zentralpotential, Wasserstoffatom

5 Freitag: Störungsrechnung

Ausblick

Literatur

- [1] Wolfgang Nolting. *Quantenmechanik – Grundlagen*. 6. Auflage. Berlin, Heidelberg: Springer, 2004.
- [2] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Revised Edition. Reading, Massachusetts: Addison-Wesley, 1994.