

Skript zum Repetitorium

Grundlagen der Quantenmechanik

Hildegard Uecker Andreas Sorge

24. 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
1.1 Die Wellenfunktion	5
1.2 Materiewellen	5
1.3 Interpretation der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsdichte	6
1.4 Quantenmechanische Observablen	7
1.5 Die stationäre Schrödingergleichung	8
1.6 Beispiel: Die Potentialstufe	8
2 Dienstag: Dirac-Formalismus	9
2.1 Der Stern-Gerlach-Versuch	9
2.1.1 Aufbau und gemessene Größen	9
2.1.2 Hintereinanderschaltung von Stern-Gerlach-Apparaturen	11
2.2 Zustände, Observable, Operatoren	12
2.2.1 Der quantenmechanische Zustand (ket-Vektoren)	12
2.2.2 Observablen	13
2.2.3 Duale Zustandsvektoren (bras) und Skalarprodukt	14
2.2.4 Operatoren	15
2.3 Physikalische Interpretation	16
2.4 Das Spin- $\frac{1}{2}$ -System und die Pauli-Matrizen	16
2.5 Die Wellenfunktion im Dirac-Formalismus	16
2.6 Die Dynamik von Quantensystemen	16
2.6.1 Zeitentwicklung der Zustände (Schrödinger-Bild)	16
2.6.2 Zeitentwicklung der Observablen (Heisenberg-Bild)	16
3 Mittwoch: Harmonischer Oszillator	17
4 Donnerstag: Drehimpuls, Zentralpotential, Wasserstoffatom	19
5 Freitag: Störungsrechnung	21
Ausblick	23
Literatur	25

Didaktischer Ansatz

Die Woche im Überblick

1 Montag: Wellenmechanik

1.1 Die Wellenfunktion

Die Tatsache, daß Teilchen Welleneigenschaften haben, legt es nahe, Teilchen mit Hilfe von Wellen zu beschreiben. Spezielle Wellen sind die ebenen Wellen:

$$\Psi(\vec{x}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \quad (1.1)$$

mit einer Dispersionsrelation $\omega = \omega(\vec{k})$ (Beispiel Lichtwelle: $\omega = c|\vec{k}|$).

Ebene Wellen sind überall im Raum verteilt. Um ein lokalisiertes Teilchen zu beschreiben, muß man ebene Wellen zu sogenannten Wellenpaketen überlagern:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d^3k \hat{\Psi}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d^3k \hat{\Psi}(\vec{k}, t) e^{i\vec{k}\vec{x}}. \quad (1.2)$$

Die Funktionen Ψ und $\hat{\Psi}$ sind also gerade über die Fouriertransformation miteinander verbunden.

1.2 Materiewellen

Für Materiewellen freier Teilchen gilt mit $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ und $E = \frac{|\vec{p}|^2}{2m}$ die Dispersionsrelation:

$$\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar|\vec{k}|^2}{2m}. \quad (1.3)$$

Ableiten der Funktion $\Psi(\vec{x}, t)$ liefert allgemein:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d^3k \hat{\Psi}(\vec{k}) (-i\omega) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)} \quad (1.4)$$

$$\Delta \Psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int d^3k \hat{\Psi}(\vec{k}) (-|\vec{k}|^2) e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}. \quad (1.5)$$

Damit gilt für Materiewellen mit obiger Dispersionsrelation:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{x}, t). \quad (1.6)$$

Die ist die *Schrödingergleichung für freie Teilchen*.

Was ändert sich für Teilchen in einem Potential $U(\vec{x})$? Es gilt nun $E = \hbar\omega = \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{x})$. Damit ergibt sich die Schrödingergleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = H \Psi(\vec{x}, t) \quad (1.7)$$

1 Montag: Wellenmechanik

mit dem Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{x}). \quad (1.8)$$

Für Lösungen der Schrödingergleichung gilt:

1. Superpositionsprinzip: Sind Ψ, ϕ Lösungen, dann ist auch $\alpha\Psi + \beta\phi$ mit $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ eine Lösung.
2. Determiniertheit: Wenn wir $\Psi(\cdot, 0)$ kennen, ist durch die Schrödingergleichung die Wellenfunktion zu allen Zeiten bestimmt.
3. Erhaltungssatz: Es gilt $\int d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = \text{const.}$ (Beweis: $\int d^3x |\Psi(\vec{x}, t)|^2 = \int d^3k |\Psi(\vec{k}, t)|^2 = \int d^3k |\Psi(\vec{k})e^{i\omega t}|^2 = \int d^3k |\Psi(\vec{k})|^2$, wobei wir die Parsevalsche Gleichung verwendet haben.)

1.3 Interpretation der Wellenfunktion als Wahrscheinlichkeitsdichte

Das Betragsquadrat der normierten Wellenfunktion wird als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert, d.h. $|\Psi(\vec{x}, t)|^2 d^3x$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen zum Zeitpunkt t in einem Volumenelement d^3x am Ort \vec{x} zu finden. Entsprechend ist $|\hat{\Psi}(\vec{k}, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Wellenvektor (direkter Zusammenhang zum Impuls: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$).

Wir betrachten nun die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\vec{x}, t)\Psi^*(\vec{x}, t)|^2 &= \dot{\Psi}\Psi^* + \Psi\dot{\Psi}^* = -\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\Psi)\Psi^* + \frac{i}{\hbar}\Psi(\hat{H}\Psi^*) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\Psi) + U(\vec{x})\Psi \right] \Psi^* + \frac{i}{\hbar} \Psi \left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\Delta\Psi^*) + U(\vec{x})\Psi^* \right] \\ &= \frac{\hbar}{2mi} [(\Delta\Psi^*)\Psi - (\Delta\Psi)\Psi^*]. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Mit der Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi]$ ergibt sich die Kontinuitätsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (1.10)$$

mit

$$\rho(\vec{x}, t) = |\Psi(\vec{x}, t)|^2. \quad (1.11)$$

1.4 Quantenmechanische Observablen

Zunächst benötigen wir einige Definitionen.

Definition: Das Skalarprodukt zweier Wellenfunktionen Ψ und ϕ ist gegeben durch

$$(\phi, \Psi) := \int d^3x \phi^*(\vec{x}) \Psi(\vec{x}). \quad (1.12)$$

Definition: A^+ heißt zu A adjungierter Operator, wenn gilt:

$$(A^+ \phi, \Psi) = (\phi, A \Psi) \quad (1.13)$$

für beliebige ϕ, Ψ .

Definition: Der Operator A heißt hermitisch, wenn $A^+ = A$. Für hermitische Operatoren gilt:

1. Eigenwerte hermitischer Operatoren sind reell.
2. Eigenfunktionen hermitischer Operatoren zu verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.

Die Eigenfunktionen der für uns relevanten Operatoren sind vollständig, d.h., sie spannen den ganzen Raum auf.

Observablen werden durch hermitische Operatoren beschrieben. Der Mittelwert im Zustand Ψ ist gegeben durch

$$\langle A \rangle = \int d^3x \Psi^*(\vec{x}, t) A \Psi(\vec{x}, t). \quad (1.14)$$

Die Zeitentwicklung des Mittelwerts wird beschrieben durch:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad (1.15)$$

mit dem Kommutator $[B, C] = BC - CB$. Diesen Zusammenhang nennt man das *Ehrenfestsche Theorem*.

Quantenmechanische Zustände $\Psi(\vec{x})$ lassen sich nach Eigenfunktionen hermitischer Operatoren entwickeln, z.B. für ein diskretes Spektrum:

$$\Psi(\vec{x}) = \sum_n c_n \Psi_n(\vec{x}) \quad \text{mit} \quad c_n = (\Psi_n, \Psi). \quad (1.16)$$

Dabei gilt: $\sum_n |c_n|^2 = 1$.

Für den Mittelwert der Observablen, die durch den Operator A beschrieben wird, finden wir:

$$\langle A \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n. \quad (1.17)$$

Interpretation: Mit Wahrscheinlichkeit $|c_n|^2$ messen wir den Wert a_n . Die Wellenfunktion geht dann in den Zustand Ψ_n über.

Beispiele für Operatoren (mit kontinuierlichem Spektrum) sind der Orts- und der Impulsoperator.

Ortsoperator (in einer Dimension):

1 Montag: Wellenmechanik

- Eigenwertgleichung: $x\Psi_\xi(x) = \xi\Psi_\xi(x)$
- Eigenfunktionen: $\Psi_\xi(x) = \delta(x - \xi)$.

Impulsoperator (in einer Dimension):

- Eigenwertgleichung: $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_p(x) = p\Psi_p(x)$.
- Eigenfunktionen: $\Psi_p(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ipx/\hbar}$.

1.5 Die stationäre Schrödingergleichung

Falls das Potential $U(\vec{x})$ zeitunabhängig ist, kann die Schrödingergleichung mittels eines Separationsansatzes gelöst werden:

$$\Psi(\vec{x}, t) = f(t)\Psi(\vec{x}). \quad (1.18)$$

Einsetzen dieses Ansatzes liefert:

$$\frac{1}{f(t)} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = \frac{1}{\Psi(\vec{x})} H\Psi(\vec{x}). \quad (1.19)$$

Die linke Seite hängt nur von t ab, die rechte nur von x . Beide Seiten müssen also gleich einer Konstanten E sein. Damit ergibt sich für den zeitabhängigen Teil:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = E f(t) \quad \Rightarrow \quad f(t) = e^{-iEt/\hbar}. \quad (1.20)$$

Für den ortsabhängigen Teil erhalten wir:

$$H\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}). \quad (1.21)$$

Diese Gleichung nennt man *zeitunabhängige Schrödingergleichung*. (Die Zustände $\Psi(\vec{x}, t) = \exp(-iEt/\hbar)\Psi(\vec{x})$ heißen stationäre Zustände, da gilt: $|\Psi(\vec{x}, t)|^2 = |\Psi(\vec{x})|^2$.)

Die allgemeine Lösung der Schrödingergleichung läßt sich nun nach diesen stationären Lösungen entwickeln:

$$\Psi(\vec{x}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \Psi_n(\vec{x}) \quad \text{mit} \quad c_n = (\Psi_n, \Psi(t=0)). \quad (1.22)$$

1.6 Beispiel: Die Potentialstufe

siehe z.B. Schwabl, Quantenmechanik

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?

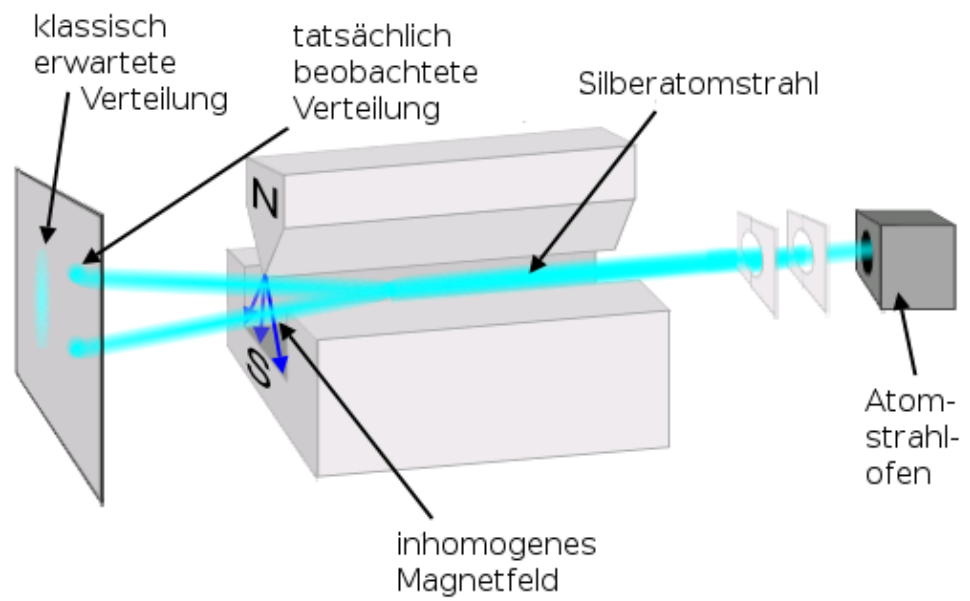


Abbildung 2.1: Der Stern-Gerlach-Versuch (1922). Grafik: Theresa Knott, Wikimedia Commons, lizenziert unter CreativeCommons-Lizenz by-sa-3.0.

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

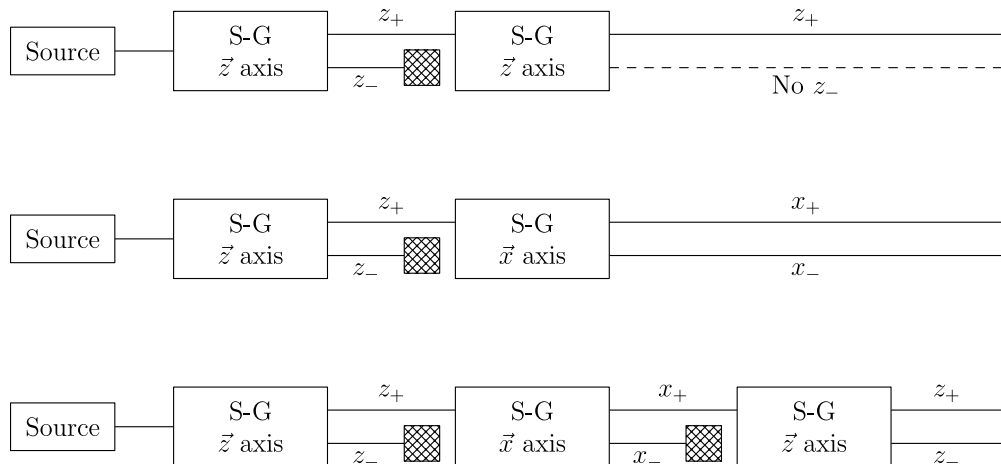


Abbildung 2.2: Sequentielle Stern-Gerlach-Versuche. Grafik: Francesco Versaci, Wikimedia Commons, Public Domain.

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 $\langle\alpha| \in \mathcal{H}^*\mathcal{H}$ im Dualraum von \mathcal{H} , dem Raum $\mathcal{H}^*\mathcal{H}$ 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 $\mathcal{H}^*\mathcal{H}$ 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 $|\alpha\rangle$ *normiert*, 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 normierte 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.

Eigenschaft 1. Auf ein ket $|\alpha\rangle$ wirkt ein Operator \hat{X} ganz normal „von links“, d.h. $\hat{X}(|\alpha\rangle) \equiv \hat{X}|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ ist wieder ein ket.

Eigenschaft 2. Wie Funktionen auf den reellen Zahlen auch werden Operatoren darüber definiert, wie sie auf (alle) kets wirken.

Beispiel. 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.

Eigenschaft 3. Operatoren lassen sich „wie Zahlen“ zu neuen Operatoren addieren, kommutativ und assoziativ:

$$\hat{X} + \hat{Y} = \hat{Y} + \hat{X} \quad (2.8)$$

$$\hat{X} + (\hat{Y} + \hat{Z}) = (\hat{X} + \hat{Y}) + \hat{Z} \quad (2.9)$$

Eigenschaft 4. Operatoren sind linear:

$$\hat{X}(c_\alpha|\alpha\rangle + c_\beta|\beta\rangle) = c_\alpha\hat{X}|\alpha\rangle + c_\beta\hat{X}|\beta\rangle \quad (2.10)$$

Eigenschaft 5. Operatoren wirken auch auf bras, und zwar *von rechts*!

$$\hat{X}(\langle\alpha|) \equiv \langle\alpha|\hat{X} \in \mathcal{H}^* \quad (2.11)$$

$\langle\alpha|\hat{X}$ ist wieder ein bra!

Notiz. Im Allgemeinen korrespondiert das bra $\langle\alpha|\hat{X}$ nicht mit dem ket $\hat{X}|\alpha\rangle$! Aber:

Definition 4. Sei \hat{X} ein Operator. Der zu \hat{X} *hermitesch adjungierte Operator* oder auch einfach *adjungierte Operator* \hat{X}^\dagger sei für alle kets $|\alpha\rangle$ definiert über die duale Korrespondenz

$$\hat{X}|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha|\hat{X}^\dagger \quad (2.12)$$

Definition 5. Gilt für einen Operator $\hat{X}^\dagger = \hat{X}$, d.h. $\hat{X}|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha|\hat{X}$ für alle kets $|\alpha\rangle$, so heißt \hat{X} *hermitesch*.

Eigenschaft 6. Wir können Operatoren multiplizieren, d.h. hintereinander auf einen Zustandsvektor $|\alpha\rangle$ anwenden, und wieder ein ket erhalten: $\hat{Y}\hat{X}|\alpha\rangle \equiv \hat{Y}(\hat{X}|\alpha\rangle) \in \mathcal{H}$.

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

Der Hamilton-Operator des harmonischen Oszillators ist

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2. \quad (3.1)$$

Wie wollen nun die stationäre Schrödingergleichung

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (3.2)$$

lösen. Dazu verwenden wir die Methode der **Auf- und Absteigeoperatoren**. (Warum die Operatoren so heißen, werden wir weiter unten sehen.) Der Auf- bzw. Absteigeoperator des harmonischen Oszillators ist gegeben durch

$$\hat{a} = \frac{\omega m \hat{X} + i \hat{P}}{\sqrt{2\omega m \hbar}}, \hat{a}^+ = \frac{\omega m \hat{X} - i \hat{P}}{\sqrt{2\omega m \hbar}}. \quad (3.3)$$

Bemerkung: Die beiden Operatoren sind nicht hermitisch.

Damit lassen sich der Orts- und der Impulsoperator schreiben als

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(\hat{a} + \hat{a}^+), \hat{P} = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^+). \quad (3.4)$$

Es gilt:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = \hat{1}. \quad (3.5)$$

Damit lautet der Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+) = \frac{1}{2}\hbar\omega(2\hat{a}^+\hat{a} + \hat{1}) = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right). \quad (3.6)$$

Somit ist das Problem auf die Auffindung der Eigenwerte des **Besetzungszahloperators**

$$\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a} \quad (3.7)$$

zurückgeführt.

Es sei $|\nu\rangle$ Eigenzustand zum Eigenwert ν . Es gilt:

$$\begin{aligned} \nu\langle\nu|\nu\rangle &= \langle\nu|\hat{a}^+\hat{a}|\nu\rangle \geq 0 \quad (= 0 \text{ für } |\hat{a}|\nu\rangle = 0). \\ \Rightarrow \nu &\geq 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

D.h. $\nu = 0$ ist der niedrigstmögliche EW. Gibt es dazu einen EV? Ja! (aus $|\hat{a}|\nu\rangle = 0$ in der Ortsdarstellung berechenbar).

3 Mittwoch: Harmonischer Oszillator

Wir werden jetzt die übrigen Eigenwerte und Eigenvektoren berechnen. Dazu brauchen wir zunächst zwei weitere Relationen:

$$[\hat{n}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+, [\hat{n}, \hat{a}] = -\hat{a}. \quad (3.9)$$

(Denn: $[\underbrace{\hat{a}^+ \hat{a}}_{\hat{n}}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \underbrace{[\hat{a}, \hat{a}^+]}_{=1} + \underbrace{[\hat{a}^+, \hat{a}^+]}_{=0} \hat{a} = \hat{a}^+$ und $[\hat{n}, \hat{a}] = \hat{a}^+ [\hat{a}, \hat{a}] + [\hat{a}^+, \hat{a}] \hat{a} = -\hat{a}.$)

Behauptung: $\hat{a}^+|\nu\rangle$ ist Eigenfunktion zum Eigenwert $\nu + 1$.

$$\hat{n}\hat{a}^+|\nu\rangle = (\hat{a}^+\hat{n} + \hat{a}^+)|\nu\rangle = (\nu + 1)\hat{a}^+|\nu\rangle. \quad (3.10)$$

Normierung:

$$\langle\nu|\hat{a}\hat{a}^+|\nu\rangle = \langle\nu|\hat{a}^+\hat{a} + 1|\nu\rangle = (\nu + 1)\langle\nu|\nu\rangle > 0. \quad (3.11)$$

Somit gilt für auf 1 normierte $|\nu\rangle, |\nu + 1\rangle$:

$$\hat{a}^+|\nu\rangle = \sqrt{\nu + 1}|\nu + 1\rangle. \quad (3.12)$$

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.