Mitschrift der Vorlesung "Theoretische Physik 3: Quantenmechanik" im SS14 an der FAU-Erlangen

Benjamin Lotter

Contents

Chapter 1

Einführung

1.1 Wiederholung klassische Mechanik

Massepunkt in $1D$: $x(t)$
$m \cdot x(t) = F = -\frac{dU}{dx}$ Impuls $p(t) = m\dot{x}(t)$
$x(0), p(0)$ bekannt $\longrightarrow x(t), p(t)$ bestimmt für alle $t > 0$.
Klassische Mechanik: kausal, deterministisch
Quantenmechanik: kausal, nicht deterministisch **Lagrange-Formalismus**

$$L = T - v = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V(x)$$

Euler-Lagrange-Gleichung:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$$
$$\frac{d}{dt}m\dot{x} - \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \Rightarrow mx = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Hamilton-Formalismus

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$$

Hamilton-Funktion:

$$H(x,p) = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} - L = p\frac{p}{m} - \left[\underbrace{\frac{1}{2}m\dot{x}^2}_{\frac{p^2}{2m}} - V(x)\right]$$
$$= \frac{1}{2m}p^2 + V(x) = T + V = E_{tot}$$

Bewegungsgleichung:

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$
$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

1.2 Grenzen der klassischen Physik - Quantenphänomene

Eigenschaften elektromagnetischer Strahlung

1. Hohlraumstrahlung Frequenzverteilung nicht klassisch erklärbar
2. Photoeffekt

Erklärung: Planck(1900), Einstein (1905)

Lichtquanten (Photone) mit Energie $E = h\nu$ ($h = 6.626 \cdot 10^{-34} Js$ Plancksches Wirkungsquantum).

Eigenschaften von Materie

1. direkte Linien in der Spektroskopie Atommodelle: Rutherford, Bohr
2. Bewegung von Teilchen zeight Welleneigenschaften Postulat de Broglie (1923) Materieteilchen lassen sich wie Wellen beschreiben $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$

Beispiele:

1. Ball ($m = 1kg$) mit Geschwindigkeit $v = 10\frac{m}{s}$

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} Js}{10kg\frac{m}{s}} = 6.6 \cdot 10^{-35} m$$

2. Elektron mit Energe $100eV (\simeq 1.6 \cdot 10^{-17} J)$

$$\lambda = 1.2 \cdot 10^{-10} m = 1.2 \text{Å}$$

Experimente: Davison / Germer (1927): Beugung von Elektronen an Kristallen.

Chapter 2

Grundprinzipien der Quantenmechanik und erste Anwendungen

2.1 Wellenfunktion, Schrödingergleichung und die Postulate der Quantenmechanik

1. Postulat (Wellenfunktion, Zustand)

Der Zustand eines quantenmechanischen Systems wird durch eine Wellenfunktion (Zustandsfunktion/Zustand) Ψ beschrieben, die i.A von den Koordinaten aller Teilchen un der Zeit abhängt.

Z.B ein Teilchen $\vec{r} = (x, y, z) \quad \Psi(x, y, z, t) = \Psi(\vec{x}, t)$

Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen (zur Zeit t) im Bereich $V \in \mathbb{R}^3$ zu finden ist gegeben durch

$$\int_V d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2$$

Für infinitesimale Volumen dV ist $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$ die Wahrscheinlichkeit das Teilchen in dV um $\vec{r}$ zu finden.

$\varphi(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeitsdichte.

Es gilt die Normierungsbedingung

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$$

fall Ψ quadratintegrabel. **Bemerkungen:**

1. Systeme mit n Teilchen $\vec{r}_j = (x_j), y_j, z_j) \quad j = 1 \dots n \to \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, t)$

   H_2 Molekül (2 Elektronen, 2 Protonen): $\Psi(r_1, r_2, r_3, r_4, t)$

2. i.A $\Psi(\vec{r}, t) \in \mathbb{C}$

3. Ψ ist bist auf globalen Phasenfaktor eindeutig

$$\tilde{\Psi}(\vec{r},t) = e^{ia}\Psi(\vec{r},t)$$
$$\tilde{\varphi} = |\tilde{\Psi}|^2 = |\Psi|^2 = \varphi$$

4. Mathe: $\Psi \in W$, W Vektorraum (Hilbertraum)

   Es gilt Superpositionsprinzip: $\Psi_1, \Psi_2 \in W$ mögliche Systemzustände, dann auch $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2 \in W$, $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$.

   Betrachte Teilchen mit Masse m, Geschwindigkeit v:

   Mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}, \lambda = \frac{h}{mv}, k = \frac{mv}{\frac{h}{2\pi}}$ folgt

$$e^{ikz} = e^{\frac{i}{\hbar}mvz}$$

   Rechts:

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \Psi_1(x) + \Psi_2(x)\\ \Psi_{1/2}(x) &= ne^{\frac{imv}{2\hbar L}\left(x\pm\frac{d}{2}\right)^2}\\ &= ne^{\frac{imv}{2\hbar L}\left(x^2+\frac{d}{r}\right)}\ e^{\pm\frac{imvxd}{2\hbar L}}\end{aligned}$$

   Intensität am Schirm $\sim \varphi(x)$:

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= |\Psi(x)|^2 = |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2\\ &= |\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2 \ + 2\,\mathrm{Re}\left(\Psi_1(x)\Psi_2^*(x)\right)\\ &= |n|^2\left(1 + 1 + 2\,\mathrm{Re}\left(e^{-2i\ \frac{mvxd}{2\hbar L}}\right)\right)\\ &= 2|m|^2\left(1 + \cos\left(\frac{mvd}{\hbar L}x\right)\right)\end{aligned}$$

5. quantenmechanische Wahrscheinlichtkeitsbeschreibung

$$\varphi(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2$$

   Aussage über eine Vielzahl von Messungen an identischen Systemen.

   $\longrightarrow$ Indeterminisums

Messbare Größen in der klassischen Mechanik: Funktion auf dem Phasenraum:

Funktion $A(x,p)$

Energie $E_{kin} = \frac{p^2}{2m} \to E = H(x,p)$

Drehimpuls $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$

2. Postulat

Jeder messbaren Gröse (Observable) A ist ein (linear, hermetischer) Operator $\hat{A}$ zugeordnet. Man erhält $\hat{A}$ indem man im klassischen Ausdruck $A(x,p)$ dier ERsetzung durchführt.

$$\underbrace{p_z \to \hat{p_x} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}}_{Impulsoperator} \qquad \qquad \underbrace{x \to \hat{x} := x}_{Ortsoperator}$$

Analog $3D$

$$p_z \to \hat{p_y} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y} \qquad \qquad y \to \hat{y} := y$$
$$p_z \to \hat{p_z} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \qquad \qquad z \to \hat{z} := z$$

Bemerkungen:

1. hermetische Operatoren: Mathe lineare Abbildungen $l\colon W \to W$.

   Notation QM:

   $$\mathring{A}\colon W \to W$$
   $$\mathring{A}\Psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r},t)$$

   Beispiele:

   (a) Ortsoperator

   $$\hat{x}\Psi(x,y,z) = x\Psi(x,y,z)$$
   $$\hat{y}\Psi(x,y,z) = y\Psi(x,y,z)$$

   (b) Impulsoperator

   $$\hat{p_x}\Psi(x,y,z) = \frac{\hbar}{-i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,y,z) \qquad \text{(Differentialoperator)}$$

   (c) kinetische Energie:

   $$\text{Klassisch: } T = \frac{p^2}{2m}$$
   $$\text{Quantenmechanik : } \hat{T} = T(\hat{x},\hat{p}) = \frac{1}{2m}\hat{p_x}^2 = \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2}{i^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$
   $$\hat{T}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi$$

$$3D\colon\ T = \frac{1}{2m}\left(p_x^2, + p_y^2 + p_z^2\right)$$
$$\hat{T} = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right)$$
$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

(d) Energie: Hamiltonoperator

$$\text{klassisch: Hamiltonfunktion: } H(r,p) = \frac{p^2}{m} + V(x)$$
$$\text{Quantenmechanik : } \hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p_1}) = \frac{1}{2m}\hat{p_x}^2 + V(\hat{x})$$
$$= -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

$$\hat{H}\Psi(x) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x)$$
$$3D\colon\ \frac{1}{2m}\left(\hat{p_x}^2 + \hat{p_y}^2 + \hat{p_z}^2\right) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x,y,z)$$

3.Postulat (Mittelwert, Erwartungswert)

Der Mittelwert (Erwartungswert) einer physikalischen Observablen A für ein System im Zustand Ψ ist

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle(t) = \int d^3r\Psi^*(\vec{r},t)\hat{A}\Psi(\vec{r},t)$$