

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: $x(t)$

$m \cdot \ddot{x}(t) = F = -\frac{dU}{dx}$ Impuls $p(t) = m\dot{x}(t)$

$x(0), p(0)$ bekannt $\rightarrow x(t), p(t)$ 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:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} &= 0 \\ \frac{d}{dt} m\dot{x} - \frac{\partial V}{\partial x} &= 0 \Rightarrow m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}\end{aligned}$$

Hamilton-Formalismus

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

Hamilton-Funktion:

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

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 (Photonen) 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 zeigt 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 Energie $100eV (\simeq 1.6 \cdot 10^{-17} J)$

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

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

2.1.1 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 und der Zeit abhängt.

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

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 quadratintegabel. **Bemerkungen:**

1. Systeme mit n Teilchen $\vec{r}_j = (x_j, y_j, z_j)$ $j = 1 \dots n \rightarrow \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n, t)$
 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 bis auf globalen Phasenfaktor eindeutig

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

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:

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

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

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

5. quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsbeschreibung

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

Aussage über eine Vielzahl von Messungen an identischen Systemen.

—> Indeterminismus

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

Funktion $A(x, p)$

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

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

2.1.2 2. Postulat

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

$$p_x \rightarrow \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \quad \quad x \rightarrow \hat{x} := x$$

Impulsoperator *Ortsoperator*

Analog 3D

$$p_y \rightarrow \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad \quad \quad y \rightarrow \hat{y} := y$$

$$p_z \rightarrow \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad \quad \quad z \rightarrow \hat{z} := z$$

Bemerkungen:

1. hermitesche Operatoren: Mathe lineare Abbildungen $l: W \rightarrow W$.

Notation QM:

$$\hat{A}: W \rightarrow W$$

$$\hat{A}\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t)$$

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

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

(c) kinetische Energie:

$$\text{Klassisch: } T = \frac{p^2}{2m}$$

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

$$\hat{T}\Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi$$

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

(d) Energie: Hamiltonoperator

$$\text{klassisch: Hamiltonfunktion: } H(r, p) = \frac{p^2}{m} + V(x)$$

$$\begin{aligned}
\text{Quantenmechanik: } \hat{H} &= H(\hat{x}, \hat{p}_1) = \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + V(\hat{x}) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)
\end{aligned}$$

$$\hat{H}\Psi(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x) + V(x)\Psi(x)$$

$$3D: \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z)$$

2.1.3 3. Postulat (Mittelwert, Erwartungswert)

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

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

Bemerkungen:

$$1. \text{ Beispiel: } \Psi(x) = \frac{1}{\sigma^2 \pi}^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\text{Normierung: } \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x)|^2 = 1$$

Mittelwert der Ortsmessung:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \underbrace{\hat{x} \Psi(x)}_{x \Psi(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \overbrace{|\Psi(x)|^2}^{\varphi(x)} x \\
\langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{x}_{x=x-x_0} \frac{1}{(\sigma \pi)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}} = x_0
\end{aligned}$$

Mittelwert bei Impulsmessung

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^*(x) \hat{p}(x) \Psi(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x)
\end{aligned}$$

und mit

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x) = \frac{1}{(\sigma^2 \pi)^{\frac{1}{4}}} \left(-\frac{(x - x_0)}{\sigma^2} \right) e^{-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

folgt

$$\langle \hat{p} \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{(\sigma^2 \pi)^{\frac{1}{2}}} \left(-\frac{1}{\sigma^2} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - x_0) e^{-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}} = 0$$

2. $\langle \hat{A} \rangle \in \mathbb{R} \rightarrow$ Operator \hat{A} hermitisch.

2.1.4 4. Postulat (Messwert, Wahrscheinlichkeit)

Jede einzelne Messung der Observablen A kann nur einen der Eigenwerte a_n des Operators \hat{A} liefern, definiert durch

$$\hat{A} \varphi_n(\vec{r}) = a_n \varphi_n(\vec{r}) \quad (\text{Eigenwertgleichung})$$

φ_n Eigenfunktion von \hat{A} zum Eigenwert a_n .

Die Wahrscheinlichkeit W_n bei einer Messung der Observablen A an einem System im Zustand Ψ den Eigenwert a_n zu finden, ist gegeben durch

$$W_n = \left| \int d^3r \varphi_n^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) \right|^2$$

Nach der Messung ist das System in dem eigenzustand φ_n , der dem gemessenen Eigenwert entspricht. **Bemerkungen:**

1. Annahme φ_n normiert ($\int d^3r |\varphi_n(\vec{r})|^2 = 1$)
2. In vielen Fällen: Eigenwert a_n diskret \rightarrow Messgröße A quantisiert
Beispiel: mögliche Energien des H -Atoms

$$E_n = -\frac{R}{n^2} \quad R \approx 13.6 \text{ eV}, n \in \mathbb{N}$$

3. Reduktion der Wellenfunktion Quantenmechanik : System wird i.A durch Messung verändert

$$\Psi \xrightarrow[\text{Messung von } A \text{ mit Ergebnis } a_n]{} \varphi_n$$

\rightarrow sofortige weitere Messung von A liefert wieder a_n .

Zustand des Systems nach Messung φ_n :

$$W_n = \left| \int d^3r \varphi_n^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \right|^2 = \underbrace{\left| \int d^3r \varphi_n^*(\vec{r}) \varphi_n(\vec{r}) \right|^2}_{\int d^3r |\varphi_n(\vec{r})|^2 = 1} = 1$$

4. $|\Psi(x)|^2$ Wahrscheinlichkeitsdichte für messung des Ortes x .

Verallgemeinerte Eigenfunktion des Operators:

$$\begin{aligned}\hat{x}\varphi(x) &= x\varphi(x) \\ x\varphi(x) &= x\varphi(x) \quad (x - \xi) f(x) = 0 \quad \forall x \\ \varphi_\xi(x) &= \delta(x - \xi)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}W_\xi &= \left| \int dx \varphi_\xi^*(x) \Psi(x) \right|^2 \\ &= \left| \int dx \delta(x - \xi) \Psi(x) \right|^2 = |\Psi(\xi)|^2\end{aligned}$$

5. Postulate 3 und 4 sind nicht unabhängig ($P4 \rightarrow P3$)

$$\begin{aligned}\langle \hat{x} \rangle &= \int dx \varphi(x) x = \int dx |\Psi(x)|^2 x \\ &= \int dx \Psi^*(x) x \Psi(x) = \int dx \Psi^*(x) \hat{x} \Psi(x) \\ &= \langle \hat{x} \rangle\end{aligned}$$

2.1.5 5. Postulat (Schrödingergleichung)

Die Zeitentwicklung der Zustände in der Quantenmechanik wird durch die (zeitabhängige) Schrödingergleichung bestimmt

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)}$$

Dabei ist \hat{H} der Hamiltonoperator des Systems **Bemerkungen:**

1. hier: nichtrelativistische Quantenmechanik ($v \ll c$)
- 2.

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t)\end{aligned}$$

Partielle DGL:

$$\Psi(x, t_0) \xrightarrow[Lss]{ber???} \Psi(x, t)$$

3. Plausibilität der Schrödinger Gleichung Exp: Materie hat Welleneigenschaften \rightarrow Wellengleichung

Elektrodynamik:

$$\begin{array}{ll} \text{ebene Welle:} & \Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \\ \text{Dispersionsrelation} & \omega = kc \end{array}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = -\omega^2 \Psi = -c^2 k^2 \Psi = c^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi$$

Wellengleichung in Quantenmechanik ?

$$\begin{array}{l} \Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \\ \text{de Broglie:} \quad \lambda = \frac{k}{p} \rightarrow k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\frac{h}{2\pi}} = \frac{p}{\hbar} \\ \rightarrow p = \hbar k \end{array}$$

$$E = \hbar\omega \text{ freies Teilchen } E = \frac{p^2}{2m}$$

$$\Rightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{1}{2m} \frac{p^2}{\hbar} = \boxed{\frac{\hbar k^2}{2m} = \omega(k)}$$

$$\begin{array}{l} \frac{d^2}{dt^2} \Psi = -k^2 \Psi = -\frac{2m\omega}{\hbar} \Psi = -\frac{2m}{\hbar} \frac{1}{-i} \frac{d}{dt} \Psi \\ \Rightarrow i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \underbrace{\hat{H}}_{\hat{H}=T} \Psi \end{array}$$