22.10.'08 Theo E G. Schön, M. Eschrig

Zusammenfassung Quantenmech. I:

Kap I Die Spielregeln der Quantenmechanik

Beobachtungen, Postulate, Formalismus (C.T Kap 2., 3.)

1.0 Teilchen-Wellendualität

Elektromagnetische Wellen (Lösung der MWG) mit $\boxed{\omega = 2\pi f}$ und Wellenvektor $\boxed{|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}}$ Wellenlänge λ. Elekt. Wellen sind auch Teilchen mit $\boxed{E = \hbar\omega}$ und Impuls $\boxed{\vec{p} = \hbar\vec{k}}$ (Photonen).

umgekehrt verhalten sich Teilchen auch wie Wellen und zeigen Interferenzeffekte (z.B. Doppelspalt). Die Wellenlänge λ folgt aus $\boxed{E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$ mit $\boxed{\lambda = \frac{2\pi}{k}}$

- Planck'sches Wirkungsquantum $\boxed{\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1{,}05\ldots \cdot 10^{-34}\,Js = 6\cdot 10^{-16}\,eV\cdot s}$

1 Joule $= 1\,kg\,\frac{m^2}{s^2} = 1\,V\cdot C$ Elektronladung $e = 1{,}6\cdot 10^{-19}\,C$

„$\hbar$ ist klein": die klass. Physik ist Grenzfall $\hbar \to 0$

- Zur Beschreibung eines Systems gehört die Angabe des Hamiltonoperators (quantenmech.) oder der Hamiltonfunktion/Lagrangefunktion (klass).

1.1 Der Zustand eines Systems

1.1.1 In der klassischen Mechanik

Ist der Zustand eines Teilchens durch Punkt im Phasenraum festgelegt $(\vec{r}, \vec{p})$ 6-dim Phasenraum, 3-dim Raum (für N-Teilchen 6N-dim)

1.1.2 Wellenfunktion

In der Quantenmechanik ist der Zustand durch die Wellenfkt $\psi(\vec{r}, t)$ best.

Die Wellenfunktionen (quadrat integrierbar) bilden einen Raum $\mathcal{F}$ mit folgenden Eigenschaften:

- linearer Raum: $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{F} \Rightarrow$ jede Linearkombination ist auch aus $\mathcal{F}$ $\Rightarrow \psi = \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 \in \mathcal{F}$
  $\hat{=}$ Superpositionsprinzip
- in $\mathcal{F}$ ist ein Skalarprodukt definiert $\varphi, \psi \in \mathcal{F} \Rightarrow (\varphi, \psi) = \int d^3r\, \varphi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) \in \mathbb{C}$
- $\psi(\vec{r})$ kann normiert werden $\int d^3r\, |\psi(\vec{r})|^2 = 1$
  dann ist $|\psi(\vec{r})|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte das Teilchen bei $\vec{r}$ zu finden
- $\mathcal{F}$ hat eine vollständige, orthonormale und normierbare Basis. $u_i(\vec{r})$ $i = 1, 2, \ldots$

$\boxed{(u_i, u_j) = \delta_{ij}}$ (orthonormiert) vollständig: jedes $\psi(\vec r)$ kann in die Basis entwickelt werden $\boxed{\psi(\vec r) = \sum_i c_i\, u_i(\vec r)}$

umgekehrt: $c_j = (u_j, \psi)$ einsetzen: $\psi(\vec r) = \sum_i (u_i, \psi)\, u_i(\vec r)$

$$= \int d^3r' \sum_i u_i^*(r')\, \psi(r')\, u_i(\vec r)$$

Vollständigkeitsrelation $\boxed{= \int d^3r' \underbrace{\sum_i u_i^*(r')\, u_i(\vec r)}_{=\delta(\vec r - \vec r')} \psi(r')}$

Nach der Wahl einer Basis können wir die Wellenfkt $\psi(\vec r)$ durch die Entwicklungskoeffizienten c_i darstellen $\psi(\vec r) \longrightarrow \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_\infty \end{pmatrix}$

1.1.3 Vektor im Hilbert-Raum

Allgemeiner gilt: Der Zustand eines quantenmech. Teilchens ist charakterisiert durch einen Zustandsvektor $|\psi\rangle$ "Ket" (≙ Zustand) aus einem Zustandsraum $\mathcal{H}$

$\psi(\vec r) \in \mathcal{F} \longleftrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ (≙ Spaltenvektor)

Es gibt auch den dualen Raum $\mathcal{H}^+$ von "Bras" $\langle\psi|$ (≙ Zeilenvektor)

Jeweils 2 Zuständen ist ein Skalarprodukt zugeordnet

$(\varphi, \psi) \leftrightarrow \langle\varphi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$
$= \langle\psi|\varphi\rangle^*$

Superpositionsprinzip: $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathcal{H} \Rightarrow |\psi\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle \in \mathcal{H}$

Linearität: (in Ket) $\langle\varphi|\psi\rangle = \lambda_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi|\psi_2\rangle$

Antilinearität: (in "Bra") $\langle\psi|\varphi\rangle = \lambda_1^*\langle\psi_1|\varphi\rangle + \lambda_2^*\langle\psi_2|\varphi\rangle$

Also: $\mathcal{H}$ ist ein linearer Raum mit Skalarprodukt. Das nennt man Hilbertraum

Basis $|u_i\rangle$, orthonormiert $\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$, vollständig: jedes $|\psi\rangle$ kann entwickelt werden

$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i \underbrace{\langle u_i|\psi\rangle}_{\in \mathbb{C}} |u_i\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$

$\Rightarrow \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1}$

Übergang von Ket und Bra zu Wellenfunktionen:

$\langle\vec r|\psi\rangle = \psi(\vec r)$ $\quad\langle\vec r|$ Basisvektor der Ortsdarstellung

$\langle\psi|\vec r\rangle = \psi^*(\vec r)$

$\int d^3r\, |\vec r\rangle\langle\vec r| = \mathbb{1}$ (Kontinuierliche Basis)

$\langle\varphi|\psi\rangle = \int d^3r\, \langle\varphi|\vec r\rangle\langle\vec r|\psi\rangle = \int d^3r\, \varphi^*(\vec r)\, \psi(\vec r)$

1.1.4 Verallgemeinerung auf nicht quadratintegrierbare Fkt.

Beispiel: Fourier-Transformation

1-dim Beispiel mit $\boxed{k = \frac{p}{\hbar}}$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp\, \bar\psi(p)\, e^{\frac{ipx}{\hbar}} \qquad \bar\psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx\, \psi(x)\, e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$\hat{=} \sum_i c_i u_i \qquad \hat{=} (u_i, \psi)$$

Basisvektor $u_i = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ip}{\hbar}x} \equiv v_p(x)$

Entwicklungskoeffizienten $c_i \hat{=} \bar\psi(p)$

Summation $\sum_i \hat{=} \int dp$

Es gilt:

Orthonormierung: $(v_p, v_{p'}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx\, e^{-\frac{ip}{\hbar}x} e^{\frac{ip'}{\hbar}x} = \delta(p-p')$

Vollständigkeit: $\int dp\, v_p^*(x)\, v_p(x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp\, e^{-\frac{ipx}{\hbar}} e^{\frac{ipx'}{\hbar}} = \delta(x-x')$

1.2 Lineare Operatoren und Observablen

1.2.1 Definition (Hilbertraum festgelegt durch Hamiltonoperator)

Ein linearer Operator A angewandt auf einen Zustand $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ erzeugt einen anderen Zustand $|\psi'\rangle \in \mathcal{H}$

Eigenschaften: Linearität: $A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$

Produkt $AB|\psi\rangle = A(\underbrace{B|\psi\rangle}_{|\psi'\rangle}) = |\psi''\rangle \neq BA|\psi\rangle$

Kommutator $[A,B] = AB - BA \neq 0$ (im allgemeinen)

A ist vollständig beschrieben durch (alle $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$) Matrixelemente $\langle\varphi|A|\psi\rangle$

1.2.2 Hermite'sch

zu Ket $|\psi\rangle$ gehört Bra $\langle\psi|$

zu $A|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ gehört Bra $\langle\psi'| = \langle\psi|A^+$

für Matrixelemente $\langle\psi|A^+|\varphi\rangle = \langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$

24.10.08 QM-System $\Leftrightarrow$ H:

Zustand: Vektor im Hilbertraum bzw. Wellenfkt aus $\mathcal{F}$ ($|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ bzw. $\psi(\vec r) = \langle\vec r|\psi\rangle$)

Lineare Operatoren A: $A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \in \mathcal{H}$

Hermite'sch adjungierter Op. A^+ $\quad \langle\psi'| = \langle\psi|A^+$

Hermite'sche Operatoren $A^+ = A$

1.2.3 Darstellung in Basis

$|u_i\rangle$ vollständig, orthonormiert

$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$ $\quad c_i$: Entwicklungskoeff. $\quad |\varphi\rangle = \sum_i b_i |u_i\rangle$

$\hat{=} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$ $\qquad \langle\varphi| = \sum_i \langle u_i| b_i^* \hat{=} (b_1^*, b_2^*, \dots)$

Skalarprodukt zwischen $\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i b_i^* c_i \hat{=} (\cdot)\cdot\begin{pmatrix}\vdots\end{pmatrix}$ = Matrix

Lineare Operatoren: Matrixelemente $\quad$ (Operator als Matrix darstellen in Basis)

$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \sum_{ij} \langle\varphi|u_i\rangle \underbrace{\langle u_i|A|u_j\rangle}_{A_{ij}} \langle u_j|\psi\rangle = \sum_{ij} b_i^* A_{ij} c_j = (b_1^*, \dots)\begin{pmatrix} A_{11} & \cdots \\ \vdots & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$

Hermite'sch adj. Operator A^+

$(A^+)_{ij} = \langle u_i|A^+|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^* = A_{ji}^*$

$A^+ = (A^T)^*$

Herm. Operatoren: $A^+ = A \Rightarrow A_{ii}$ reell $\quad A_{ij} = A_{ji}^*$

1.2.4 Basiswechsel durch unitäre Transformation

Statt Basis $\{|u_i\rangle\}$ wähle Basis $\{|v_k\rangle\}$

Def: Transformationsmatrix $U_{ik} \equiv \langle u_i|v_k\rangle \Rightarrow U$ ist unitär $\quad U^+U = UU^+ = \mathbb{1}$

oder $U^+ = U^{-1}$

Bew: $(U^+U)_{kl} = \sum_i U_{ki}^+ U_{il} = \sum_i \langle v_k|u_i\rangle\langle u_i|v_l\rangle$

$= \langle v_k|v_l\rangle = \delta_{kl}$ ✓ $\quad$ mit $U_{ki}^+ = U_{ik}^* = \langle u_i|v_k\rangle^* = \langle v_k|u_i\rangle$

Basiswechsel: $\quad |\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$ $\quad$ alte Basis

$|\psi\rangle = \sum_k \tilde{c}_k |v_k\rangle$ $\quad$ neue Basis

$\tilde{c}_k = \langle v_k|\psi\rangle = \sum_i \langle v_k|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i U_{ki}^+ c_i$

oder $c_i = \sum_k U_{ik} \tilde{c}_k$

Matrixelemente:

$\tilde{A}_{kl} = \langle v_k|A|v_l\rangle = \sum_{ij} \langle v_k|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|v_l\rangle = \sum_{ij} U_{ki}^+ A_{ij} U_{jl}$

$\tilde{A} = U^+ A U \quad , A = U \tilde{A} U^+$

1.2.5 Eigenwertprobleme

Ein lineares Operator A hat Eigenvektoren und Eigenwerte

$A \underbrace{|\psi_n\rangle}_{\text{Eigenvektor}} = \underbrace{\lambda_n}_{\text{Eigenwert}} |\psi_n\rangle$ $\qquad \alpha = |\alpha| e^{i\theta}$

- mit $|\psi_n\rangle$ ist auch $\alpha|\psi_n\rangle$ ein Eigenvektor, Normierung legt $|\alpha|$ fest, aber Phase θ ist beliebig (relative Phasen sind wichtig)
- absolute Phasen sind unwichtig

• λ_n ist nicht entartet, wenn es (bis auf α) nur einen zugehörigen EV gibt

• λ_n ist g_n-fach entartet, wenn es g_n-linear unabh. EV gibt

$A|\psi_n^i\rangle = \lambda_n|\psi_n^i\rangle \qquad (i = 1, \ldots g_n$ bei Entartung$)$

Lösen des Eigenwert-Problems $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

• wähle eine orthonormierte vollst. Basis $\{|u_i\rangle\}$

$\Rightarrow \langle u_i|A|\psi\rangle = \lambda \underbrace{\langle u_i|\psi\rangle}_{=:c_i}$

$= \sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \sum_j A_{ij}\, c_j = \lambda\, c_i$

$\Rightarrow \sum_j (A_{ij} - \lambda\,\delta_{ij})\,c_j = 0$

lineares homogenes Gleichungssystem, nicht triviale Lösungen gibt es nur für $\det(A - \lambda\mathbb{1}) = 0$

Lösung nach Methoden der LA

oder durch Diagonalisierung durch unitäre Trafo

$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

$U^+ A \overset{\mathbb{1}}{\widetilde{U U^+}}|\psi\rangle = \lambda\, U^+|\psi\rangle \qquad U^+|\psi\rangle = |\psi'\rangle$

$\Rightarrow \tilde{A}|\psi'\rangle = \lambda|\psi'\rangle \qquad \Rightarrow \tilde{A} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \qquad |\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}, \ldots$

wähle U so, dass $\tilde{A}$ diagonal ist $\Rightarrow$ EW und EV trivial ablesbar

1.2.6 Observablen

"Observablen" sind Hermite'sche Operatoren, deren EV eine vollständige Basis bilden. Physikalische Größen sind dargestellt durch Observablen

Hermite'sch $\Rightarrow$ 1) alle EW a_n sind reell (QM1)

$A|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ 2) EV zu verschieden EW sind orthogonal

Vollständigkeit wichtig für Messung

Seien A und B zwei kommutierende Observablen $[A,B] = 0$, dann haben sie einen gemeinsamen Satz von EV, die eine Basis bilden im Zustandsraum

$A|u_{np}\rangle = a_n|u_{np}\rangle \qquad n = 1, 2, \ldots$

$B|u_{np}\rangle = b_p|u_{np}\rangle \qquad p = 1, \ldots$

Wenn alle (a_n, b_p) verschieden sind, dann bilden A und B einen vollst. Satz kommutierender (vertauschender) Observablen wenn einige (a_n, b_p) entartet sind, dann gibt es eine weiter Observable C mit $[A,C]=[B,C]=0$

und $A|u_{npq}\rangle = a_n|u_{npq}\rangle$, $B|u_{npq}\rangle = b_p|u_{npq}\rangle$, $C|u_{npq}\rangle = c_q|u_{npq}\rangle$ ...

Beispiel: Wasserstoffatom $[H,L^2]=[H,L_z]=[L^2,L_z]=0$

$$H|\psi_{nlm}\rangle = E_n|\psi_{nlm}\rangle, \quad L^2|\dots\rangle = \hbar^2 l(l+1)|\dots\rangle, \quad L_z|\dots\rangle = \hbar m|\dots\rangle$$

$n=1\dots$; $l=0,\dots n-1$, ; $-l\le m<l$

1.2.7 Beispiele von Observablen (C.T. Kap 2)

Ortsoperator $\vec{R}=\begin{pmatrix}X\\Y\\Z\end{pmatrix}$ EW-Probleme $\vec{R}|\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0|\vec{r}_0\rangle$

Ortsdarstellung (Wellenfkt): $\vec{R}\,\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \vec{r}_0\,\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ $\quad \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\vec{r}_0\rangle$

Es gilt: $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$ orthonormiert: $\int d\vec{r}\,\xi^*_{\vec{r}_0'}(\vec{r})\,\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r}_0-\vec{r}_0')$

vollständig: $\psi(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}\; c_{\vec{r}_0}\,\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ passt für $c_{\vec{r}_0}=\psi(\vec{r}_0)$

$$= \int d^3\vec{r}\;\psi(\vec{r}_0)\,\delta(\vec{r}-\vec{r}_0)$$

$\Rightarrow$ Vollständigkeitsrelation:

$$\int d^3\vec{r}_0\;\xi^*_{\vec{r}_0}(\vec{r})\,\underset{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}')}{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}')} = \delta(\vec{r}-\vec{r}') = \int d^3\vec{r}_0\;\langle\vec{r}'|\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0|\vec{r}\rangle = \langle\vec{r}'|\vec{r}\rangle$$

mit $\boxed{\int d^3\vec{r}_0\;|\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0| = \mathbb{1}}$

Wirkung von $\vec{R}$ auf beliebige Wellenfkt

$$R\,\psi(\vec{r}) = R\int d^3\vec{r}_0\;\psi(\vec{r}_0)\,\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}_0\;\psi(\vec{r}_0)\,\vec{r}_0\,\delta(\vec{r}-\vec{r}_0) = \vec{r}\,\psi(\vec{r})$$

Wirkung: einfache Multiplikation mit $\vec{r}$

Impulsoperator $P|\vec{p}_0\rangle = \vec{p}_0|\vec{p}_0\rangle$

Ortsdarstellung $P\,v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = \vec{p}_0\,v_{\vec{p}_0}(\vec{r})$ $\quad v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\vec{p}_0\rangle$

Teilchen sind Wellen mit Impuls $=\hbar\vec{k}$

$\Rightarrow v_{\vec{p}_0}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}e^{i\frac{\vec{p}\vec{r}}{\hbar}}$ (3-dim)

vollständig: Fourier Trafo, orthonormiert:

$\hookrightarrow \int d^3p_0\; v_{\vec{p}_0}(\vec{r})\,v_{\vec{p}_0}(\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \Rightarrow \int d^3p_0\;|p_0\rangle\langle p_0| = \mathbb{1}$

Wirkung von $\vec{P}$ auf beliebigen Zustand $\vec{P}\psi(\vec{r}) = P\int d^3p_0\;\underset{\uparrow}{\bar{\psi}(\vec{p}_0)}\,v_{\vec{p}_0}(\vec{r})$

$$= \int d^3p_0\;\bar{\psi}(p_0)\,\vec{p}_0\,\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}e^{i\frac{\vec{p}_0\vec{r}}{\hbar}} = \int d^3p_0\;\bar{\psi}(p_0)\,\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\,v_{\vec{p}_0}(\vec{r})$$

$$= \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\,\psi(\vec{r})$$