Dynamik: stationäre Zustände

$\{|u_n\rangle\}$ seien Energie-EV: $\hat{H}|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle$; $\hat{H}$: zeitunabhängig

- Zeitentwicklung von $|u_n\rangle$

$$t = 0: \qquad |u_n(0)\rangle$$

$$t > 0: \qquad |u_n(t)\rangle = \hat{U}(t,0)|u_n(0)\rangle = e^{-itE_n/\hbar}|u_n(0)\rangle \sim |u_n(0)\rangle$$

Eine globale Phase $e^{i\delta}$ ändert die Physik nicht!

$$\langle u_n(t)|\hat{A}|u_n(t)\rangle = \langle u_n(0)|\hat{A}|u_n(0)\rangle$$

EV von $\hat{H} \Longrightarrow$ stationäre Zustände

- Zeitentwicklung eines beliebigen Zustandes $|\psi\rangle$

$$t = 0: \qquad |\psi(0)\rangle = \sum_n \alpha_n |u_n\rangle$$

$$t > 0: \qquad |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle = \sum_n \alpha_n e^{-itE_n/\hbar}|u_n\rangle$$

Dirac-Schreibweise:

$$\hat{U}(t,0) = \sum_n |u_n\rangle\langle u_n| e^{-itE_n/\hbar}$$

Wellenmechanik

Materiewellen

QM: Teilchen (z.B. Elektronen) haben Welleneigenschaften

Wellenfunktion eines freien Teilchens mit Impuls $\boldsymbol{p}$ und Energie $E = \boldsymbol{p}^2/2m$

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = C e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \omega t)} \quad \text{mit } \omega = \frac{E}{\hbar}, \boldsymbol{k} = \frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}$$

Doppelspaltexperiment

Wahrscheinlichkeitsverteilung auf dem Schirm:

$$\rho \propto |\psi_1 + \psi_2|^2 = \rho_1 + \rho_2 + \boxed{\psi_1^* \psi_2 + \psi_1 \psi_2^*}$$

- Das Interferenzmuster bleibt bestehen, wenn die Elektronen *einzeln* auftreten.
- Wahrscheinlichkeitsinterpretation: $|\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2 d^3x$ ist die W'keit, das Teilchen zur Zeit t am Ort $\boldsymbol{x}$ im Volumenelement d^3x zu finden

das schönste physikalische Experiment: (physicsworld)

Doppelspalt-Exp. mit Elektronen(C.Jönsson 1961)

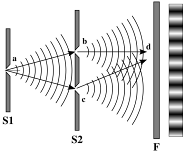
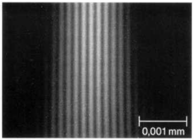


Fig: Wikipedia



Klassische Mechanik vs Quantenmechanik

	klassisch	QM
Ort	$\boldsymbol{x}$	$\hat{\boldsymbol{x}}$
Impuls	$\boldsymbol{p}$	$\hat{\boldsymbol{p}}$
Dynamische Variable	$F(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})$	$\hat{F}(\hat{\boldsymbol{x}},\hat{\boldsymbol{p}})$
Hamiltonian	$H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}) = \dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x})$ $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}) = \dfrac{(\boldsymbol{p} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}))^2}{2m} + q\Phi(\boldsymbol{x})$	$\hat{H}(\hat{\boldsymbol{x}},\hat{\boldsymbol{p}}) = \dfrac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})$ $\hat{H}(\hat{\boldsymbol{x}},\hat{\boldsymbol{p}}) = \dfrac{(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\hat{\boldsymbol{A}}(\hat{\boldsymbol{x}}))^2}{2m} + q\hat{\Phi}(\hat{\boldsymbol{x}})$
BewegungsGl.	$\dfrac{dA}{dt} = [A, H] + \dfrac{\partial A}{\partial t}$	$\dfrac{d\hat{A}}{dt} = \dfrac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{H}] + \dfrac{\partial \hat{A}}{\partial t}$
Liouville	$\dfrac{\partial \rho}{\partial t} + [\rho, H] = 0$	$\dfrac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + \dfrac{1}{i\hbar}[\hat{\rho}, \hat{H}] = 0$

OrtsDarstellung: Ortsoperator

Wellenfunktion: $\psi(\boldsymbol{x})$
die W'keit, das Teilchen irgendwo im Raum zu finden: $\int d\boldsymbol{x} |\psi(\boldsymbol{x})|^2 = 1$
$\Longrightarrow \quad \psi(\boldsymbol{x}) \in \mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, d\boldsymbol{x})$
OrtsOperator:

$$\hat{\boldsymbol{x}}\psi(\boldsymbol{x}) = \underbrace{\boldsymbol{x}}_{\in\mathbb{R}^3}\psi(\boldsymbol{x}) \qquad \text{(Multiplikationsoperator)}$$

Spektralzerlegung von $\hat{\boldsymbol{x}}$ (Dirac):

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \int_{\mathbb{R}^3} d\boldsymbol{x}\, \boldsymbol{x} |\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}|$$

$|\boldsymbol{x}\rangle$ ist orthonormal und vollständig in folgendem Sinne:

$$\begin{cases} \langle\boldsymbol{x}'|\boldsymbol{x}\rangle = \delta^{(3)}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \\ \hat{I} = \int_{\mathbb{R}^3} d\boldsymbol{x} |\boldsymbol{x}\rangle\langle\boldsymbol{x}| \end{cases}$$

$$\psi(\boldsymbol{x}) := \langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle = \int d\boldsymbol{x}' \langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle\langle\boldsymbol{x}'|\psi\rangle = \int d\boldsymbol{x}' \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}')$$

OrtsDarstellung: Impulsoperator

- Impuls als Erzeuger der räumlichen Translation
  Translation im homogenen Raum

$$\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x-a)$$

$$|\hat{T}_a \psi(x)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad \Longrightarrow \quad \hat{T}: \text{ unitär}$$

Infinitesimale Translation $s \ll 1$:

$$\hat{I} = \hat{T}_s \hat{T}_s^\dagger = 1 + s\left(\frac{d\hat{T}}{ds} + \frac{d\hat{T}^\dagger}{ds}\right)\Big|_{s=0} + \mathcal{O}(s^2)$$

$$\frac{d\hat{T}}{ds}\Big|_{s=0} = -i\hat{K} \quad \text{mit } \hat{K} = \hat{K}^\dagger$$

$$[\hat{K}] = \left[\frac{1}{\text{Länge}}\right] \xrightarrow[\frac{p}{\hbar}=\frac{2\pi}{\lambda}]{} \hat{K} = \frac{\hat{p}}{\hbar}$$

- ImpulsOperator:

$$|\boldsymbol{s}| \ll 1: \quad \hat{T}_{\boldsymbol{s}} \psi(\boldsymbol{x}) = (1 - i\boldsymbol{s} \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{\hbar})\psi(\boldsymbol{x}) = \psi(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{x})$$

$$\Longrightarrow \quad \hat{\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{x}) = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{x}) \qquad \text{(Differentialoperator)}$$

in 1D $\quad \hat{p}_\alpha = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x_\alpha}$

Kanonische Vertauschungsrelationen

- $$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\hat{I}$$

  Mit $\hat{x}_\alpha\psi(x) = x_\alpha\psi(x)$ und $\hat{p}_\beta\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\partial_\beta\psi(x)$:

  $$(\hat{x}_\alpha\hat{p}_\beta - \hat{p}_\beta\hat{x}_\alpha)\,\psi(x) = \cdots$$

  - Beschränkte Operatoren können niemals diese Vertauschungsrelation erfüllen.
  - Heisenbergsche Unschärferelation: $\Delta_x \cdot \Delta_p \geq \frac{\hbar}{2}$
    Es ist also unmöglich, qm Teilchen so zu präparieren, dass die Schwankungen bei Orts- und Impulsmessung beiden beliebig klein sind. Δ_x und Δ_p beziehen sich auf unabhängige Messungen an einer Teilchengesamtheit.

- $$[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0$$

  folgt aus $[\hat{T}_a^\alpha, \hat{T}_a^\beta] = 0$

- $$[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta] = 0$$

FourierTransformation

- $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$, $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^n$
  FourierTransformierte zu ψ
  $$\widetilde{\psi}(\boldsymbol{p}) := (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} d\boldsymbol{x}\, \psi(\boldsymbol{x}) e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}$$
  Rücktransformation:
  $$\psi(\boldsymbol{x}) := (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} d\boldsymbol{p}\, \widetilde{\psi}(\boldsymbol{p}) e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}$$
- Eine beliebige Wellenfunktion kann als Linearkombination (als Integral) von ebenen Wellen dargestellt werden
- F.T.$\equiv$ unitäre Transformation zwischen x- und p-Darstellungen
  $$\int d\boldsymbol{p} |\widetilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2 = \int d\boldsymbol{x} |\psi(\boldsymbol{x})|^2 = 1 \quad (\text{PARSEVAL})$$
  $\Longrightarrow |\widetilde{\psi}(\boldsymbol{p})|^2$: W'keitsdichte im Impulsraum
- DIRAC-Notation
  $$\langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle = \int d\boldsymbol{x}\, \langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{x}\rangle\langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle, \quad \langle \boldsymbol{x}|\psi\rangle = \int d\boldsymbol{p}\, \langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}\rangle\langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle$$
  Transformationselement: $\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}} e^{i\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}/\hbar} = \langle \boldsymbol{p}|\boldsymbol{x}\rangle^*$

ImpulsDarstellung

Wellenfunktion: $\psi(\boldsymbol{p}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3, d\boldsymbol{p})$

$|\psi(\boldsymbol{p})|^2 d\boldsymbol{p}$: die W'keit, den Impuls des Teilchens in $d\boldsymbol{p}$ um $\boldsymbol{p}$ herum zu finden

- ImpulsOperator:

$$\hat{\boldsymbol{p}}\psi(\boldsymbol{p}) = \underbrace{\boldsymbol{p}}_{\in\mathbb{R}^3}\psi(\boldsymbol{p}) \qquad \text{(Multiplikationsoperator)}$$

Spektralzerlegung von $\hat{\boldsymbol{p}}$ (Dirac):

$$\hat{\boldsymbol{p}} = \int_{\mathbb{R}^3} d\boldsymbol{p}\, \boldsymbol{p} |\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}|$$

$|\boldsymbol{p}\rangle$ ist orthonormal und vollständig in folgendem Sinne:

$$\begin{cases} \langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{p}\rangle = \delta^{(3)}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \\ \hat{I} = \int_{\mathbb{R}^3} d\boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}\rangle\langle\boldsymbol{p}| \end{cases}$$

$$\psi(\boldsymbol{p}) := \langle\boldsymbol{p}|\psi\rangle = \int d\boldsymbol{p}'\langle\boldsymbol{p}|\boldsymbol{p}'\rangle\langle\boldsymbol{p}'|\psi\rangle = \int d\boldsymbol{p}'\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\psi(\boldsymbol{p}')$$

- OrtsOperator:

$$\hat{\boldsymbol{x}}\psi(\boldsymbol{p}) = i\hbar\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{p}) \qquad \text{(Differentialoperator)}$$

SchrödingerGl. in der x-Darstellung

BewegungsGl. eines Punktteilchens der Masse m im Potential $V(\boldsymbol{x})$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t) = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}^2 + \hat{V}(\hat{\boldsymbol{x}})\right]}_{\hat{H}}\psi(\boldsymbol{x},t)$$

KontinuitätsGleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{x},t) = -\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t)$$

mit

$$\rho = |\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \qquad \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}$$

$$\boldsymbol{j} = \frac{\hbar}{2mi}\Big(\psi^*(\boldsymbol{\nabla}\psi) - (\boldsymbol{\nabla}\psi^*)\psi\Big) \qquad \text{Wahrscheinlichkeitsstromdichte}$$

$$\left(\boldsymbol{j} = \frac{1}{m}\Re\Big(\psi^*[\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}]\psi\Big)\right)$$

Zeitentwicklung freier Teilchen

Zerfließen des Wellenpakets mit $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$

(Wellenpaket: zur Beschreibung eines "lokalisierten" Teilchens)

- $t = 0$: 1D Gaußsches Wellenpaket

$$\psi(x,0) = e^{ix\frac{p_0}{\hbar}} \frac{e^{-\frac{x^2}{2\Delta^2}}}{(\pi\Delta^2)^{\frac{1}{4}}}$$

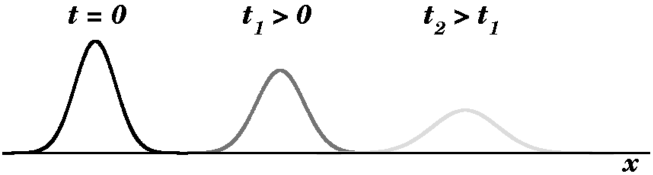
minimale Unschärfe: $\Delta_x \cdot \Delta_p = \frac{\hbar}{2}$

- $t > 0$

$$\psi(x,t) = \cdots \quad \text{(auch ein Gaußsches Wellenpaket)}$$

OrtsErwartungswert: $\langle \hat{x} \rangle(t) = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} t$ (Ehrenfestsches Theorem)

OrtsUnschärfe: $\Delta_x(t) = \frac{\Delta}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \Delta^4}} \; (> \Delta_x(0))$



die Unschärfe nimmt mit der Zeit zu!