

Ferienkurs zur theoretischen Quantenmechanik im Anschluss an das WS 08/09 an der Technischen Universität München

Tutoren:

Jinming Lu, Konrad Schönleber

16.02.09-20.2.08

1 Begriffe der Quantenmechanik

Zu Beginn des 20. Jahrhunderts änderte sich die Art wie die Welt auf physikalischer Ebene betrachtet wird grundlegend. Zu dieser Zeit glaubte man mit den Methoden der klassischen Mechanik, der Elektrodynamik und der statistischen Physik, alle physikalischen Phänomene beschreiben zu können.

Obleich diese Theorien tatsächlich eine große Anzahl von experimentellen Erkenntnissen erklären konnten (und können), scheiterten sie an der Erklärung anderer (Schwarzkörperstrahlung, Elektronenbeugung, etc.). Dies führte, neben der Entwicklung der Relativitätstheorie, über einen Zeitraum von ca. 30 Jahren zur Entwicklung der Quantenmechanik.

Im Zuge dieser Entwicklung wurden eine Reihe von fundamentalen Begriffen wie etwa Zeit, Raum, Teilchen usw., hinterfragt und neu interpretiert. Bis heute sind die philosophischen Diskussionen um diese Begriffe nicht zum Erliegen gekommen und bieten weiterhin Anknüpfungspunkte für neue Ideen und Ansätze innerhalb und außerhalb der Physik.

1.1 Zustand

Der grundlegende Begriff auf dem wir aufbauen wollen, ist der des Zustands. Ein Zustand ist ein Satz von (prinzipiell unendlich vielen) Eigenschaften eines quantenmechanischen Systems (Atom, harmonischer Oszillator, etc.).

Grundsätzlich können Zustände entweder besetzt oder unbesetzt sein.

Ist ein Zustand besetzt so sagt man es liegt ein Teilchen (oder Teilchenensemble im Fall von Vielteilchenzuständen) im entsprechenden Zustand vor.

Der Zustand selbst existiert aber unabhängig davon ob er besetzt ist oder nicht!

Mathematisch beschrieben werden Zustände als Vektoren in einem unendlichdimensionalen Hilbertraum über den komplexen Zahlen. Sie sind komplexwertige Funktionen und die übliche Schreibweise in der Physik ist die Dirac-Notation:

$$|\Psi\rangle$$

Auf dem Hilbertraum ist ein hermitesches Skalarprodukt definiert:

$$\langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle^*$$

Wie bei jedem Vektorraum kann man eine beliebige Basis für den Hilbertraum auswählen und jeden Zustand $|\Psi\rangle$ in dieser darstellen:

$$|\Psi\rangle = \sum_k c_k |k\rangle := \sum_k |k\rangle \langle k|\Psi\rangle$$

$|\Psi\rangle$ wird also auf die jeweiligen $|k\rangle$ projiziert. Man nennt konsequenterweise $\widehat{P}_k = |k\rangle\langle k|$ den Projektionsoperator auf $|k\rangle$.

In vielen Fällen betrachten wir die Zustände nicht in voller Abstraktion. Speziell zwei Projektionen interessieren uns häufig, die in den Ortsraum und die in den Impulsraum.

Wir nennen dann:

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{x}) &:= \langle \vec{x}|\Psi\rangle \\ \Psi(\vec{k}) &:= \langle \vec{k}|\Psi\rangle\end{aligned}$$

die Orts- bzw. Impulswellenfunktion. Durch Fouriertransformation können wir von der einen in die andere Darstellung wechseln. Zustände müssen normiert sein, d.h.:

$$\langle \Psi|\Psi\rangle := \int \Psi^* \Psi \cdot dq = 1$$

Hier ist q eine Variable in Ψ und es wird über das gesamte System integriert.

1.2 Operator

Im vorangegangenen Abschnitt haben wir festgestellt, dass sich die Eigenschaften eines Teilchens allein aus dem Zustand ablesen lassen in dem es sich befindet. Die Zustände selbst sind jedoch mathematisch als abstrakte Vektoren beschrieben. Wir müssen also einen Weg finden auch die Messgrößen und Messvorgänge abstrakt mathematisch zu beschreiben. Dies ist möglich durch eine Identifikation der Messgrößen (Observablen) mit Operatoren (auf dem Hilbertraum), deren Erwartungswerte uns dann das gewünschte Messergebnis liefern. Wir wollen uns nun etwas eingehender mit den Eigenschaften der Operatoren beschäftigen:

Aus der linearen Algebra ist bekannt, dass man lineare Abbildungen (oder eben Operatoren) als Matrix darstellen kann. Die exakte Darstellung hängt dabei von der gewählten Basis des Vektorraumes (eigentlich wählt man 2 Basen für die Darstellung in unserem Fall sind sie jedoch identisch) ab.

Dies funktioniert natürlich genauso im Hilbertraum.

Wir bezeichnen mit $|k\rangle$ und $|k'\rangle$ zwei Basisvektoren, es folgt:

$$\widehat{O}|k\rangle = \sum_{k'} |k'\rangle \langle k'|\widehat{O}|k\rangle$$

Die Größe $\langle k'|\widehat{O}|k\rangle$ ist dann das Matricelement in der k -ten Zeile und k' -ten Spalte.

Jeder Operator der eine physikalische Größe darstellt ist hermitesch, d.h. seine Eigenwerte sind alle reell bzw. es gilt:

$$\widehat{O}^\dagger = (\widehat{O}^T)^* = \widehat{O}$$

Man nennt \widehat{O}^\dagger den zu \widehat{O} hermitech adjungierten Operator.

Für den Erwartungswert einer Messgröße M des Teilchens repräsentiert durch den Operator \widehat{O} , gilt (im Ortsraum):

$$\langle M \rangle_{|\Psi\rangle} = \langle \Psi | \widehat{O} | \Psi \rangle = \int \Psi^* \widehat{O} \Psi dx$$

Dieses Ergebnis ist als Erwartungswert eine statistische Größe. Der Erwartungswert des Varianzoperators ist:

$$\Delta \widehat{O}^2 = \langle \widehat{O}^2 \rangle - \langle \widehat{O} \rangle^2 = \langle (\widehat{O} - \langle \widehat{O} \rangle)^2 \rangle$$

Nach dem sog. Korrespondenzprinzip geben wir nun ein paar Messgrößen und ihre zugehörigen quantenmechanischen Operatoren an:

Im Ortsraum:

$$\vec{x} \rightarrow \vec{x}; \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla_x; E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Im Impulsraum:

$$\vec{x} \rightarrow i\hbar \nabla_p; \vec{p} \rightarrow \vec{p}; E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

1.3 Schrödingergleichung

Übertragen wir die Operatorschreibweise auf eine klassische Hamiltongleichung für ein Teilchen mit Gesamtenergie E in einer Dimension (3d siehe Dienstag)

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + V$$

so erhalten wir die Schrödingergleichung im Ortsraum:

$$\widehat{H} \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t)$$

Diese bildet stets den Ausgangspunkt zur Berechnung von $\Psi(x, t)$.

Die Zeitunabhängige Schrödingergleichung erhält man durch einen Separationsansatz:

$$\Psi(x, t) = \Psi_1(x) \Psi_2(t)$$

$$i\hbar \partial_t \Psi_1(x) \Psi_2(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_1(x) \Psi_2(t) + V(x) \Psi_1(x) \Psi_2(t)$$

$$\Leftrightarrow \Psi_1(x) i\hbar \partial_t \Psi_2(t) = -\Psi_2(t) \frac{\hbar^2}{2m} \Psi_1(x) + V(x) \Psi_1(x) \Psi_2(t)$$

Mit:

$$E := \frac{i\hbar \partial_t \Psi_2(t)}{\Psi_2(t)} = \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi_1(x)}{\Psi_1(x)} + V(x)$$

folgt:

$$E \Psi_1(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_1(x) + V(x) \Psi_1(x)$$

Es gilt dann:

$$\Psi_2(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Man kann also die Zeitentwicklung eines Zustandes mit bestimmter Energie explizit angeben.

1.4 Bewegungsgleichung für Operatoren

Bisher sind wir immer von zeitabhängigen Zuständen und zeitunabhängigen Operatoren (Schrödinger-Bild) ausgegangen.

Viele Problemstellungen sind jedoch einfacher zu lösen, wenn statt dessen eine Zeitabhängigkeit der Observablen (also der Operatoren) angenommen wird. Die bezeichnet man als Heisenberg-Bild.

Im späteren Verlauf der Vorlesung werden wir noch das Wechselwirkungs- oder Dirac-Bild kennen lernen.

Wir fordern, dass die Beobachtungsergebnisse Betrachtungsunabhängig sein sollen.

Im Schrödinger-Bild gilt:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\Psi\rangle$$

Sei nun A ein Operator im Schrödingerbild, dann folgt:

$$\langle\Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi|e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar}|\Psi\rangle$$

Daher ist der Operator A ins Heisenberg-Bild übertragen:

$$A(t) = e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar}$$

Hiermit lässt sich nun die sehr wichtige Bewegungsgleichung für Heisenberg-Operatoren herleiten:

$$\frac{d}{dt}A(t) = \frac{iH}{\hbar}e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar} - \frac{i}{\hbar}e^{iHt/\hbar}AH e^{-iHt/\hbar} = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)]$$

Dies bedeutet insbesondere, dass durch Operatoren die mit dem Hamiltonoperator kommutieren Erhaltungsgrößen beschreiben sind.

2 Modell und Interpretation

2.1 Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Die Zeitunabhängige Schrödingergleichung hat die Form einer (räumlichen) Schwingungsgleichung, daher nennt man $\Psi(x, t)$ auch (Orts-)Wellenfunktion. Wir wollen nun darstellen welche physikalische Bedeutung sie hat.

Da $\Psi(x, t)$ eine komplexwertige Funktion ist, kann sie nicht selbst eine reelle Größe darstellen. Man interpretiert stattdessen die reelle Funktion $|\Psi(x, t)|^2$ als die Wahrscheinlichkeit ein den Zustand $|\Psi\rangle$ besetzendes Teilchen an der Stelle x zur Zeit t zu detektieren.

$|\Psi(x, t)|^2$ wird also als die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (präziser wäre Detektierungswahrscheinlichkeitsdichte) des Teilchens im Zustand Ψ aufgefasst.

An dieser Stelle können wir auch die oben gemachte Forderung

$$\int \Psi^* \Psi dx = 1$$

verstehen, da die Gesamtwahrscheinlichkeit das Teilchen irgendwo im System zu detektieren gleich 1 sein muss.

Diese Interpretation liefert eine überzeugende Erklärung vieler Experimente.

Sehr vereinfacht kann man also sagen, dass ein Teilchen bei seiner Wechselwirkung mit anderen Teilchen (z.B. durch Streuung) Teilchencharakter besitzt, d.h. es kann Zustände besetzen bzw. verlassen und auch andere Teilchen dazu anregen. Die Ausbreitung der Teilchen wird jedoch durch die Gestalt und Zeitentwicklung der Zustände und damit durch die Schrödingergleichung bestimmt. Sie hat also einen eher wellenförmigen Charakter. Man spricht daher häufig von "Materiewellen" (Welle-Teilchen-Dualismus).

2.2 Materiewellen

Für freie Teilchenströme ($V=0$, nicht normiert, daher Strom) liefert die Schrödingergleichung ebene Wellen als Lösungen (Anm.: In diesem Fall ist $E = \frac{p^2}{2m}$).

$$\Psi(x, t) = e^{i\frac{p}{\hbar}x - i\frac{E}{\hbar}t} = e^{ikx - i\omega t}$$

Man verwendet dabei üblicherweise die Bezeichnungen:

$$k := \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad \text{und} \quad \omega := \frac{E}{\hbar} = 2\pi f$$

Impuls und Energie der Teilchen ergeben sich zu:

$$\langle p \rangle = \frac{\hbar}{i} \partial_x \Psi(x, t) = \hbar k$$

$$\langle E \rangle = i\hbar \partial_t \Psi(x, t) = \hbar \omega$$

Diese Gleichungen schlagen eine Brücke zwischen dem Wellen und dem Teilchenbild.

2.3 Messvorgang

Wie bereits zuvor erwähnt lässt sich jeder Zustand in einen (i.d.R. unendlichen) Satz von Eigenzuständen jedes beliebigen hermiteschen Operators entwickeln. Da jede Messgröße durch einen solchen Operator dargestellt ist, kann zu jeder Messgröße eine solche Entwicklung in Eigenzustände (Fourierentwicklung) vorgenommen werden.

Seien also beispielsweise $G \rightarrow \hat{G}$ die zu messende Größe und $|\Phi_{G,n}\rangle$ alle Eigenzustände von \hat{G} . Wir können nun entwickeln:

$$|\Psi\rangle = \sum c_n \cdot |\Phi_{G,n}\rangle$$

Wir wissen selbstverständlich vor der Messung noch nicht welchen Wert die Größe G annehmen wird. Wir fordern jedoch, dass ein einmal gemessener Wert reproduzierbar ist. Messen wir also ein zweites mal, so soll die Messung wieder den Wert der ersten Messung ergeben. Würden wir diese Forderung fallen lassen, so gäbe es keine Möglichkeit irgendwelche quantitativen Aussagen über das System zu treffen und die gesamte Theorie wäre nutzlos.

Was bedeutet die Forderung nach Reproduzierbarkeit konkret?

Sie impliziert, dass das Anwenden des Operators \hat{G} auf den gemessenen Zustand diesen nicht verändern darf, d.h. dieser Zustand muss ein Eigenzustand sein.

Es ist also nur möglich Eigenzustände zu messen mit den entsprechenden Eigenwerten als Messergebnisse. Nun ist aber unmittelbar klar, dass der Zustand

$|\Psi\rangle$ selbst kein Eigenzustand des Systems sein muss. Nach der Messung liegt jedoch ein Eigenzustand vor, woraus sofort folgt, dass der Messvorgang selbst das System verändert. Man sagt das System wird in den Eigenzustand projiziert. Diese Tatsache hat das Weltbild der Physik nachhaltig verändert, da feste Begriffe wie z.B. Determinismus neu hinterfragt werden müssen.

Wenn das System nur in Eigenzuständen von \hat{G} vorkommt, welche Bedeutung hat dann $|\Psi\rangle$? Immerhin können wir ja die Gestalt von $|\Psi\rangle$ z.B. durch die Schrödingergleichung und die Messung einer anderen Observablen bestimmen. Um dies zu klären betrachten wir:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum c_n^2 \cdot \langle\Phi_{G,n}|\Phi_{G,n}\rangle$$

(Alle gemischten Terme fallen weg, da die normierten Eigenzustände eine Orthonormalbasis bilden.)

In dieser Darstellung erkennen wir, dass es sinnvoll ist c_n^2 als die Wahrscheinlichkeit zu interpretieren mit der Eigenzustand $\Phi_{G,n}$ gemessen wird.

Hier sei nochmal festgehalten, dass alle zukünftigen Messungen am bereits vermessenen System dann auch diesen Eigenzustand ergeben.

2.4 Unschärferelation

Da der Messvorgang das Ergebnis beeinflusst, ist es nur möglich verschiedene Eigenschaften des Systems gleichzeitig zu bestimmen, falls diese gemeinsame Eigenzustände besitzen. Es darf insbesondere keinen Unterschied machen, welche Größe zuerst gemessen wurde. Formal gesprochen bedeutet dies, dass der Kommutator der beiden Operatoren \hat{A} , \hat{B} gleich Null sein muss, also gilt:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = \hat{0}$$

Ist dies nicht der Fall, so ist es nicht möglich beide Größen gleichzeitig beliebig genau zu bestimmen. Konkret berechnet man die minimale Ungenauigkeit der Messungen z.B. folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \Delta\hat{A}^2 &= \langle\Psi|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)^2|\Psi\rangle =: \langle\Phi|\Phi\rangle \\ \Delta\hat{B}^2 &= \langle\Psi|(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)^2|\Psi\rangle =: \langle\eta|\eta\rangle \\ \Rightarrow \langle\Phi|\eta\rangle &= \langle\Psi|(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)|\Psi\rangle = \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle \\ \langle\eta|\Phi\rangle &= \langle\Psi|(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle)(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle)|\Psi\rangle = \langle\hat{B}\hat{A}\rangle - \langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle \\ \Rightarrow \Delta\hat{A}^2\Delta\hat{B}^2 &\stackrel{\text{Schwarz}}{\geq} |\langle\Phi|\eta\rangle|^2 \geq (Im\langle\Phi|\eta\rangle)^2 = \left(\frac{1}{2}|\langle\Phi|\eta\rangle\langle\eta|\Phi\rangle|\right)^2 = \frac{1}{4}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|^2 \end{aligned}$$

Wir erhalten also:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle_\Psi|$$

Der Index Ψ soll hierbei andeuten, dass für viele Größenpaare die Messunschärfe von den einzelnen Zuständen abhängt.

Wir interessieren uns aber vor allem für die Paare (E,t) und (x,p) und in diesen Fällen ist der Kommutator konstant. Es gelten:

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Man nennt solche Größenpaare komplementär.

2.5 Beispiel: Unschärfe Ort / Impuls

Wir wollen beispielhaft ein freies, Teilchen mit Impuls p_0 betrachten, also ein freies Teilchen ($V = 0$) bei dem wir eine Impulsmessung beliebig scharf vorgenommen haben. Es soll nun der Aufenthaltsort bestimmt werden.

Wir betrachten das Problem auf zwei Arten erst anschaulich und anschließend formal. Zunächst müssen wir uns den Messvorgang vorstellen. Wie wird die Messung bewerkstelligt? Durch die Wechselwirkung des Teilchens mit unserer Messapparatur. D.h. wir stoßen das Teilchen während des Messvorgangs (z.B. Compton-Streuung, Röntgenbeugung etc.) an und erhalten als Ergebnis einen mehr oder weniger scharfen Aufenthaltsort. Leider haben wir das Teilchen während der Messung angestoßen und somit seinen Impuls verändert.

Um den Ort genau bestimmen zu können muss die de-Broglie-Wellenlänge des Messteilchens möglichst klein sein, d.h. der Impuls des gemessenen Teilchens verändert sich stark.

Formal lässt sich der beliebig scharfe Impulszustand als Deltafunktion schreiben:

$$\Psi(k) = \delta(k - k_0)$$

wobei $p_0 = \hbar k_0$ gilt. Über Fouriertransformation erhalten wir in einem System der Größe L die Darstellung $\Psi(x)$:

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(k) e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x}$$

Die Normierungsbedingung in einem endlichen Intervall führt auf:

$$\begin{aligned} \frac{N^2}{2\pi} \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} e^{ik_0 x} e^{-ik_0 x} dx &= 1 \Rightarrow N = \sqrt{\frac{2\pi}{L}} \\ \Rightarrow |\Psi(x)|^2 &= \frac{1}{L} \end{aligned}$$

Es ist also jeder Aufenthaltsort innerhalb des Systems gleich wahrscheinlich. Man sagt dann, das Teilchen ist vollständig delokalisiert.