Theoretische Physik IV – Quanten

Schwerpunkte Sommersemester 2014

Schrödingergleichung in Ortsdarstellung

- Schrödingergleichung: $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) = \hat{H}\psi(\vec{r},t)$
- Hamilton-Operator: $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$ mit $\hat{\vec{r}} = \vec{r}$, $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\nabla$
- Wahrscheinlichkeitsinterpretation
  - Normierung $\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,|\psi(\vec{r},t)|^2 = 1$
  - Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$
  - Wahrscheinlichkeitsstrom $\vec{j}_{\mathrm{WK}} = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right)$
  - Kontinuitätsgleichung $\nabla\cdot\vec{j}_{\mathrm{WK}} + \dot{p} = 0$
- Separationsansatz $\psi(\vec{r},t) = \phi(\vec{r})\chi(t)$
- Zeitanteil ebene Welle $\chi(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$
- Ortsanteil zeitfreie Schrödingergleichung $\hat{H}\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$
- Lösung zeitabhängige Schrödingergleichung ($\rightarrow$ unitäre Zeitentwicklung)

Wellenmechanik

- Dispersionsbeziehung $\omega(k) = \frac{\hbar}{2m}k^2$
- ebene Welle, Gauß'sche Wellenpakete
- Orts-, Impulsoperator ($\rightarrow$ Kommutator $[\hat{x},\hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$)
- Impulsdarstellung ($\rightarrow$ Fourier-Transformation $\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\psi(x)$)
- Beipiele:
  - freies Teilchen
  - ∞-tiefer Potentialtopf
  - endlicher Potentialtopf, -wall ($\rightarrow$ Tunneleffekt)
  - Zwei-Niveau-Systeme $\rightarrow$ Rabi-Oszillation
- Ehrenfest'sche Theoreme

Wasserstoffatom $V(\hat{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\hat{r}^{-1}$

- Zentralkraftproblem $\rightarrow [\hat{H},\hat{L}^2] = 0 = [\hat{H},\hat{L}_z]$

- Separation des Drehimpulsproblems
- Eigenwertprobleme für Drehimpuls $\hat{L}^2 |l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l,m\rangle$, $\hat{L}_z |l,m\rangle = \hbar m |l,m\rangle$
  - Wertebereiche für Quantenzahlen, Entartung
  - Energieeigenwerte der gebundenen Zustände: $E_n = \frac{E_1}{n^2}$
  - Bohr'scher Radius

Harmonischer Oszillator $V(\hat{x}) = \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$

- asymptotisches Verhalten
- Sommerfeld'sche Polynomansatz $\rightarrow$ Hermite-Polynome
- Energieeigenwerte $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, Nullpunktsenergie
- Grundzustand
- Operatoren:
  - Erzeugungs-, Vernichtungsoperator $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\hat{p}$
  - Kommutator $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{1}$
  - Besetzungszahloperator $\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$, Hamiltonoperator $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{n} + \frac{1}{2}\hat{1}\right)$
- kohärenter Zustand $|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$
- Eigenwertgleichung: $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$

Drehimpulsalgebra

- Kommutatoren $[\hat{L}_p, \hat{L}_q] = \mathrm{i}\hbar\hat{L}_r$ $(p, q, r$ zyklisch)
- Richtungsquantisierung ($\rightarrow$ $\hat{L}_z$, $\hat{L}^2$)
- Eigenwerte
- Leiteroperatoren $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm \mathrm{i}\hat{L}_y$
- Spin ($\rightarrow$ Fermionen, Bosonen)

Messung

- adjungierte Operatoren $\hat{A}^\dagger$
- Observable: hermitescher Operator $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$
- Erwartungswert $\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$
- Varianz $\Delta A^2 = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2$
- gleichzeitige Messung ($\rightarrow$ Kommutator)

- Eigenwertgleichung $\hat{A} = |a_n\rangle = A_n\,|a_n\rangle$ und Eigenschaften
- Messergebnisse sind Eigenwerte von $\hat{A}$
- Wahrscheinlichkeit für Messergebnisse: $p_n = |\,\langle a_n|\psi\rangle\,|^2$
- Zustand nach der Messung: von-Neumann-Projektion

Dichteoperator

- reine/gemischte Quantenzustände $\rightarrow$ kohärente/statistische Überlagerungen
- Dichteoperator $\hat{\rho} = \sum_n p_n\,|\psi_n\rangle\,\langle\psi_n|\,,\ p_n \geq 0, \sum_n p_n = 1\ (\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1)$
- Zeitenwicklung des Dichteoperators $\mathrm{i}\hbar\dot{\hat{\rho}} = [\hat{H}, \hat{\rho}]$
- Spur, Erwartungswerte $\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{Sp}\{\hat{\rho}\hat{A}\}$

Bilder

- unitärer Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}(t-t_0)}{\hbar}\hat{H}}$ (zeitunabhängiger $\hat{H}$)
- Schrödinger-, Heisenbergbild
  - $\hat{A}_{\mathrm{H}}(t) = \hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}\hat{U}(t, t_0)$
  - zeitabhängige Erwartungswerte
  - zeitabhängige Zustände, Operatoren
  - Bewegungsgleichungen
  - Heisenberggleichung $\partial_t\hat{A}_{\mathrm{H}}(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A}_{\mathrm{H}}, \hat{H}] + (\partial_t\hat{A})_{\mathrm{H}}$
- Wechselwirkungsbild

Mathematische Grundlagen

- Hilbertraum:
  - Skalarprodukt, Norm
  - Orthonormalität: $\langle b_k|b_l\rangle = \delta_{k,l}$
  - Vollständigkeitsrelation $\hat{1} = \sum_k |b_k\rangle\langle b_k|$
  - Orthonormalbasis
  - Bra-Ket-Notation
  - dyadisches Produkt
  - erweiterter Hilbertraum
- Operatoren:
  - adjungierte Operatoren
  - Hermite'sche, unitäre Operatoren
  - Eigenwertproblem $\hat{A}|\psi_k\rangle = a_k|\psi_k\rangle$

    - Kommutator
    - Unschärferelation
- Observablen:
    - Eigenwerte
    - verträgliche Observablen
    - vollständiger Satz vertauschbarer Observablen