

Quantenmechanik II, WS 12/13

Schwerpunkte

A: Relativistische Quantenmechanik

→ relativ. invariante Wellengleichungen

- Klein-Gordon-Glg.

- Dirac-Glg.: Spin
Feinstruktur des (H-) Spektrums

B: Vielteilchen Quantenmechanik

- Systeme identischer Teilchen, 2. Quantisierung
Besetzungszahldarstellung, Erzeugungs-
Vernichtungsoperatoren

- Näherungsmethoden f. Vielteilchen systeme

C: Aspekte der Quantenfeldtheorie

I. Relativistische Quantenmechanik

1. Wellen: Schrödinger'sche Wellenmechanik

Bewegung eines Teilchens ($\rightarrow$ T.) in $U(\underline{r})$

$$E = \frac{P^2}{2m} + U(\underline{r}) \quad \xrightarrow{E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, P \rightarrow \hat{P} = -i\hbar \underline{\nabla}} \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + U(\underline{r})$$

↑
Energie eines
(nichtrelat.) T.
der Masse m
ohne Spin

Observable $\Leftrightarrow$ hermitescher Operator

$$\hat{E} = E, \quad \hat{P} = -i\hbar \underline{\nabla}$$

Korrespondenzprinzip
"1. Quantisierung"

Ortsdarstellung der QM im Hilbert-Raum

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2 + U(\underline{r}) \right] \psi(\underline{r}, t)$$

Schrödinger-Gl.
(S.G.)
für nichtrelat.
Bewegung in $U(\underline{r})$
(1)

ZUSTAND $\Leftrightarrow \psi(\underline{r}, t)$, i.d. komplexe Wellenfunktion
($\rightarrow$ W.F.)

Born'sche (statistische) Interpretation d. W.F.

$$|\psi(\underline{r}, t)|^2 d^3r = \psi(\underline{r}, t) \psi^*(\underline{r}, t) d^3r \quad \text{--- Wahrscheinlichkeit, das qm. T. zum Zeitpunkt } t \text{ in } (\underline{r}, \underline{r}+d\underline{r}) \text{ zu finden}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ($\rightarrow$ A.W.D.)

- © Nach einfachen Umformungen folgt aus der SG, eine Kontinuitätsgl. f. AWB., denn

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \cdot \psi \quad | \cdot \psi^*$$

$$\rightarrow -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + U \cdot \psi^* \quad | \cdot \psi$$

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \underbrace{\frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \right)}_{\frac{i\hbar}{2m}} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial S}{\partial t} + \text{div } \underline{j} = 0 \quad (2)$$

mit $S(\underline{r}, t) = \psi^*(\underline{r}, t) \psi(\underline{r}, t) \rightarrow$ AWB., positiv definit (3a)

und $\underline{j}(\underline{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \rightarrow$ (3b)

Wahrscheinlichkeitsstromdichte

FAZIT: SG ist als Kontinuitätsgl. für die (positive) AWB. interpretierbar.

Übergang zur klassischen Mechanik ($\rightarrow$ KH.)vgl. L², Bd III, § 18

Wir haben SG postuliert, nicht hergeleitet.

Beschreibt sie "wenigstens" im Grenzfalle $\hbar \rightarrow 0$ die KH?

Ansatz: $\psi(\underline{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(\underline{r}, t)}$

$\uparrow$ komplexwertige WF $\uparrow$ reellwertige S-Funktion

mit $S(\underline{r}, t) = S_0(\underline{r}, t) + i\hbar S_1(\underline{r}, t) + (i\hbar)^2 S_2(\underline{r}, t) + \dots$

Näherung: $\psi \simeq e^{\frac{i}{\hbar} (S_0 + i\hbar S_1)} = e^{\frac{i}{\hbar} S_0 - S_1} =$
 $= a(\underline{r}, t) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\underline{r}, t)}$

in dieser Näherung ist die AWB.

$$|\psi(\underline{r}, t)|^2 \equiv a^2(\underline{r}, t)$$

NB: $\nabla \psi \simeq e^{\frac{i}{\hbar} S_0} (\nabla a + \frac{i}{\hbar} a \nabla S_0)$

$\nabla^2 \psi \simeq e^{\frac{i}{\hbar} S_0} \left[\nabla^2 a + \frac{i}{\hbar} \nabla a \nabla S_0 + \frac{i}{\hbar} a \nabla^2 S_0 + \frac{i}{\hbar} \nabla S_0 (\nabla a + \frac{i}{\hbar} a \nabla S_0) \right] =$
 $= e^{\frac{i}{\hbar} S_0} \left[\nabla^2 a + 2 \frac{i}{\hbar} \nabla a \nabla S_0 + \frac{i}{\hbar} a \nabla^2 S_0 - \frac{1}{\hbar^2} a (\nabla S_0)^2 \right]$

$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \simeq e^{\frac{i}{\hbar} S_0} \left(i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} - a \frac{\partial S_0}{\partial t} \right)$

eingesetzt in SG ist $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \cdot \psi$

1. Wo - 4-
(linear)

$$i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} - a \frac{\partial S_0}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\nabla^2 a + 2 \frac{i}{\hbar} \nabla a \nabla S_0 + \frac{i}{\hbar} a \nabla^2 S_0 - \frac{1}{\hbar^2} a (\nabla S_0)^2 \right] + U \cdot a$$

Terme d. Ordnung $\hbar^0$: $-a \frac{\partial S_0}{\partial t} = \frac{1}{2m} a (\nabla S_0)^2 + U \cdot a$

| $a \neq 0$

$$\Rightarrow \frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S_0)^2 + U = 0$$

S_0 genügt der
Hamilton-Jakobi-Gl.
des klass. Punktteilchens.
(nichtlinear)

erinnere: $-\frac{\partial S}{\partial t} = H(\underline{r}, \nabla S, t) = \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + U(\underline{r})$
hier

Terme der Ordnung $\hbar^1$: $i \frac{\partial a}{\partial t} = -\frac{i}{m} \nabla a \nabla S_0 - \frac{1}{2m} a \nabla^2 S_0$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{2m} a \nabla^2 S_0 + \frac{1}{m} \nabla a \cdot \nabla S_0 = 0 \quad (\cdot 2a)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial a^2}{\partial t} + \nabla \left(a^2 \frac{\nabla S_0}{m} \right) = 0$$

Kontinuitätsgl. für
Aufhaltungswahrscheinlichkeitsdichte (AWD.)

Geschwindigkeit d. klassischen T. $\frac{\underline{p}}{m}$

Interpretation: Die durch die WF $\psi(\underline{r}, t)$ beschriebene Bewegung geht für $\hbar \rightarrow 0$ i.d. nicht in eine Bewegung entlang einer bestimmten Bahnkurve über. Stattdessen verschiebt sich die AWD $|\psi(\underline{r}, t)|^2$ im Laufe der Zeit in Übereinstimmung mit den Gesetzen d. KH.

FAZIT: Mit SG bleibt korrespondenz zur KH gesichert.
diese Gl. ist für $\hbar \rightarrow 0$ zumindest korrekt.

2. Die Klein-Gordon-Glg. ($\rightarrow$ KGG)

SG wahrt die Korrespondenz zur klass. Punktmechanik im Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$. Vor allem sind die aus dieser Glg. folgenden Vorhersagen für das Verhalten quant. bei niedrigen kinetischen Energien experimentell bestätigt... (QM I)

ABER: SG ist nicht Lorentz-invariant $\dots \rightarrow$

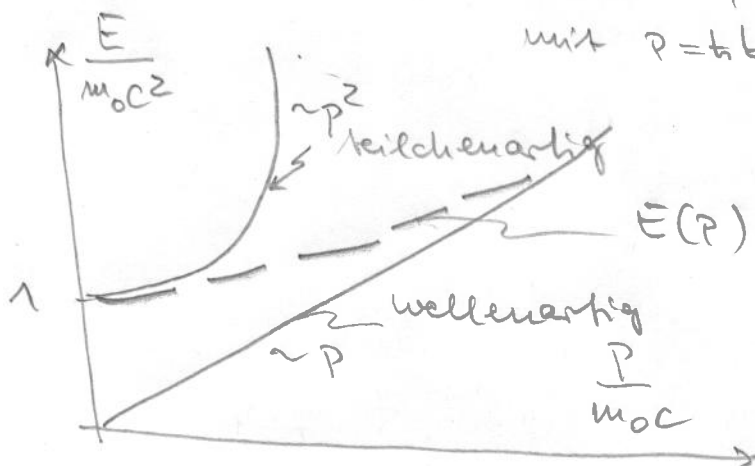
Suche nach einer relativistisch invarianten Verallgemeinerung d. SG

- ② "Aufstellung" der KGG unter Verwendung des Korrespondenzprinzips:

Ausgangspunkt: relativistische Energie-Impuls-Relation

$$E(p) = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = \begin{cases} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{Ruheenergie}}}{m_0 c^2} + \frac{p^2}{2m_0}, & p \ll m_0 c \\ \underset{\substack{\uparrow \\ \text{freie T. in LH (nichtrelativ.)}}}{p \cdot c}, & p \gg m_0 c \end{cases}$$

Ruhemasse



mit $p = \hbar k$, $E = \hbar \omega \Rightarrow \omega = ck -$

Dispersion ev. Wellen im Vakuum

Offensichtlich "interpoliert" $E(p)$ zwischen Teilchen und Wellen

Korrespondenzprinzip

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \quad \xrightarrow{\substack{E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ p \rightarrow -i\hbar \underline{\partial}}} (i\hbar \frac{\partial}{\partial t})^2 \psi = (-i\hbar \underline{\partial})^2 c^2 \psi + m_0^2 c^4 \psi$$

$$\left(\underline{\partial}^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\underline{r}, t) = 0 \quad \text{Klein-Gordon-Gl. für freie T.}$$

$$\downarrow$$

$$\left(\square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(\underline{r}, t) = 0$$

d'Alembert-Operator (L-invariant)

Die KGG ist offensichtlich ¹⁾ L-invariant: So reduziert sie sich für $m_0 = 0$ auf die (klassische) homogene Wellenglg., die aus den L-invarianten Maxwellgleichungen abgeleitet wird.

Bem.: 1) Nullgemeinungen d. KGG enthalten äußere Potentiale oder elektromagn. Felder

2) $\frac{\hbar}{m_0 c}$ ist die Compton-Wellenlänge eines T. der Masse m_0

1) oder in Vierer-Schreibweise $\left[\gamma_\mu \partial^\mu + \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \right] \psi = 0$
 $\uparrow$
 Skalarfeld, Tensorfeld
 0ter Ordnung

Physik. Interpretation d. Klein-Gordon-Gly

• Lösungen d. KGG für freie Teilchen

$$\psi(\underline{r}, t) = \psi_0 e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)} = \psi_0 e^{\frac{i}{\hbar} (\underline{p} \cdot \underline{r} - Et)} \rightarrow \text{ebene Wellen}$$

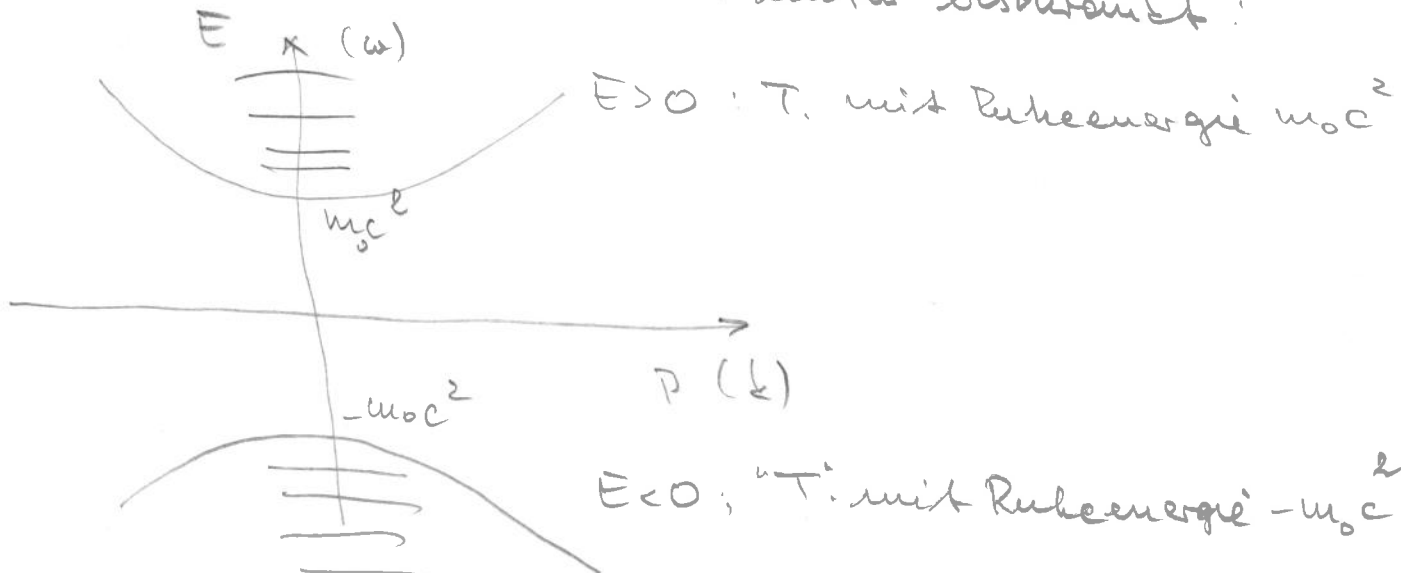
$$0 = \nabla^2 \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \psi = \left(-\frac{\underline{p}^2}{\hbar^2} - \frac{1}{c^2} \left(-\frac{E^2}{\hbar^2} \right) + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi$$

$$0: E^2 = \underline{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4$$

$$\Rightarrow E = \pm \sqrt{\underline{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

KGG für freie T. besitzt zwei Lösungen in Form ebener Wellen, eine mit positiver, die andere mit negativer Energie; letztere werden wir als Antiteilchen interpretieren (s.u.)

Die Energie ist also nicht nach unten beschränkt:



© Kontinuitätsglg.

Auch die KGG lässt sich als Kontinuitätsglg. schreiben. Analog zum Vorgehensweise auf S.-2- folgt

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{j} = 0$$

mit $\underline{j} = -\frac{\hbar i}{2m_0} (\psi^* \underline{\nabla} \psi - \psi \underline{\nabla} \psi^*)$

und

$$\rho := \frac{\hbar}{2m_0 c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)$$

{ stimmt im nichtrelat. Grenzfall mit klassisch. Stromdichte d. SG überein

Es läge nahe, ρ als WD zu interpretieren. Da aber die KGG eine Differentialglg. 2. Ordnung in t ist, können (unabh. voneinander) Anfangswerte für ψ und $\partial \psi / \partial t$ vorgegeben werden. Folglich kann ρ als Fkt. von t sowohl positiv als auch negativ sein. Damit ist eine Interpretation von ρ als positiv definite AWD. verwehrt. - aus diesem Grunde wurde lange Zeit am physikalischen Sinn der KGG gezweifelt.

© Ausweg: Ladungsinterpretation d. KGG

Definiere durch Multiplikation mit Elementarladung e

Ladungsdichte $\rho'(\underline{r}, t)$ $\rho' := \frac{i \hbar e}{2m_0 c^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right)$

Ladungsstromdichte $\underline{j}'(\underline{r}, t)$

$$\underline{j}' := -\frac{i e \hbar}{2m_0} (\psi^* \underline{\nabla} \psi - \psi \underline{\nabla} \psi^*)$$

Ladungsdichte darf positiv, negativ oder Null sein ...

Beispiel: $\rho'(\underline{r}, t)$ und $j'(\underline{r}, t)$ für freie T.

Wir finden mit

$$\psi_{(\pm)}(\underline{r}, t) = A_{(\pm)} e^{\frac{i}{\hbar}(\underline{p} \cdot \underline{r} \mp |E| t)} \quad , \quad E = \pm \sqrt{\underline{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

nach einfacher Rechnung

$$\rho'_{(\pm)}(\underline{r}, t) = \pm \frac{e |E|}{m_0 c^2} \psi_{(\pm)}^*(\underline{r}, t) \psi_{(\pm)}(\underline{r}, t)$$

Interpretation:

1) $\psi_{(+)}$ beschreibt T. mit Ladung $+e$

$\psi_{(-)}$ -- T. derselben Masse, aber Ladung $-e$.

Allgem. Lösung der KEG Linearkombination von $\psi_{(+)}$ und $\psi_{(-)}$.

2) Einstrahlung von Energie $> 2m_0 c^2$ kann zu Teilchen - Antiteilchen Erzeugung führen: Wie exp. beobachtet, treten Teilchen erzeugende und T. vernichtende Prozesse auf $\rightarrow$ keine Teilchen - Zahlerhaltung bei relativistischen Energien.

Relativ. QM als Einteilchentheorie nicht mehr konsistent...

⊙ Nichtrelativistischer Grenzfall der Klein-Gordon-Gl.

Ansatz: $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t}$

↑
Ruheenergie im Zeitfaktor
abspalten

NB: $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} m_0 c^2 \varphi \right) e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \approx -i \frac{m_0 c^2}{\hbar} \varphi e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t}$

denn $i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} \sim E' \varphi \ll m_0 c^2 \varphi$ wenn

$$E' = E - m_0 c^2 \ll m_0 c^2$$

also kinet. Energie $\ll$ Ruheenergie

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} m_0 c^2 \varphi \right) e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \approx \\ &\approx - \left(\frac{i}{\hbar} 2m_0 c^2 \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2} \varphi \right) e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} \end{aligned}$$

Einsetzen in $\left(\square^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi e^{-\frac{i}{\hbar} m_0 c^2 t} = 0$

gibt

$$-\frac{1}{c^2} \left(\frac{i}{\hbar} 2m_0 c^2 \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{m_0^2 c^4}{\hbar^2} \varphi \right) = \left(\square^2 - \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \varphi$$

also $i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \square^2 \varphi$ BG für freies T. ohne Spin

Schlussfolgerung

- 1) im nichtrelativ. Grenzfall $E' \ll m_0 c^2$
geht die KGG in die BG über
- 2) KGG ist eine relativ. invariante Wellengl.
für Teilchen mit Spin 0

⊙ Wechselwirkung mit dem elektromagnetischen Feld

Erinnere: em. Potentiale

$$(i) \quad \underline{B} = \text{rot } \underline{A}, \quad \underline{E} = -\underline{\nabla} \phi - \frac{\partial \underline{A}}{\partial t}$$

$\underline{A}$ und ϕ invariant unter der Eichtransformation

$$\underline{A} \rightarrow \underline{A}' = \underline{A} + \underline{\nabla} \chi, \quad \phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t} \quad (\chi - \text{beliebige, d.h. skalare Funktion von } \underline{r}, t)$$

(ii) Klassische Mechanik

$$H = \frac{\underline{p}^2}{2m}$$

ungeladenes T.
der Masse m

$$\longrightarrow H = \frac{\left(\underline{p} - \frac{q}{c} \underline{A}\right)^2}{2m} + q \cdot \phi$$

geladenes T. (Masse m , Ladung q)

↳ denn die hamilton'schen Bewegungsgl. führen auf Newton'sche Glg. mit Lorentz-Kraft

$$m \ddot{\underline{r}} = q (\underline{E} + \dot{\underline{r}} \times \underline{B})$$

(enthält nur die eichinvarianten Messgrößen $\underline{E}$ und $\underline{B}$)

(iii) Schrödinger-Glg. für geladenes nichtrelativist. freies Teilchen

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{\left(\hat{\underline{p}} - \frac{q}{c} \underline{A}\right)^2}{2m} + q \cdot \phi \right] \psi$$

Die entsprechende LGG ergibt sich aus $E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$
 mit der Ersetzungsregel $E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$, $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}$ zu

$$\frac{1}{c^2} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + q\phi \right)^2 \psi = \left[\left(-i\hbar \vec{\nabla} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + m_0^2 c^2 \right] \psi$$

Beispiel 1 stationäre Zustände im radialsym. Potenzial $U(r)$ → Übungsblatt