Grundlagen der nichtrelativistischen Quantenmechanik

Hannover 1.12.1990

In der erstmals vollständigen Theorie Mechanik+Elektrodynamik steht die Massenpunkt-Unterstellung im Widerspruch zu (letztlich) allen Experimenten. Teilchen sind räumlich ausgedehnt. Ein physikalisches System ist zum Zeitpunkt t in einem Zustand (Ψ), und "Frage" (= Meßapparatur = Observable = A) ist im allgemeinen etwas anderes als "Antwort" (= Meßwert = a). Bei bezüglich System-Zustand Ψ unpäßlicher Frage A kann die Meßwert-a-Antwort nur noch mit einer (sowohl meßbaren als auch vorherzusagenden) Wahrscheinlichkeit P_a gegeben werden. Die Möglichkeit, A sowohl seine päßlichen Zustände als auch die dann mit Sicherheit erhältlichen Werte a zuzuordnen, bietet das Eigenwertproblem – zu übertragen in den Hilbert-Raum (HR) der normierbaren Funktionen. Da der HR alle essentials des Mathematiker-Vektorraumes übernimmt, hat *jeder* Operator seinen Kern: $A\Psi(x) =: \int dy K(x,y)\Psi(y)$. $A^\dagger$ hat Kern $K^*(y,x)$. $A^\dagger = A \hookrightarrow a$ reell und $\varphi_{a\nu}$ VONS. Vollständigkeitsrelation: $\sum_{a,\nu} \varphi_{a\nu}(x)\varphi^*_{a\nu}(y) = \delta(x-y)$. Via Langlebigkeit aller Energie-Eigenzustände gelingt eine Quasiherleitung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung – und man "erfindet" somit die ersten 6 der folgenden *Postulate der Quantenmechanik :* $\hbar = 10^{-34} Js$

I. Alle Information über Zustand ist enth. in einwertiger Funktion $\Psi($ Variable pro Freiheitsgrad $, t) \in$ HR
II. Jede Meßgröße $\rightarrow$ linearer hermitescher Operator A (insbes. Energie $\rightarrow$ Hamiltonoperator) Tabelle! s.u.
III. Spektrum der Meßwerte a aus Lösung von $A\,\varphi_{a\nu} = a\,\varphi_{a\nu}$ (+ Normierbarkeit + Einwertigkeit)
IV. Orthonormiere $\int \varphi^*_{a\nu}\,\varphi_{b\mu} = \delta_{\nu,\mu}\cdot[\delta_{a,b}$ bzw. $\delta(a-b)]$; und Systemzustände gemäß $\int|\Psi|^2 = 1$
V. Wahrscheinlichkeit (a diskret) bzw. W.dichte (a kont.) für a-Erhalt $= P(a,t) = \sum_\nu |\int \varphi^*_{a\nu}(x)\,\Psi(x,t)|^2$
VI. System-Zukunft: $i\hbar\dot\Psi = H\Psi$, $H :=$ Hamiltonoperator (s.II.) (H kann von t abhängen)
VII. Pauli-Prinzip: $\Psi(1,2,...) = \mp\Psi(2,1,...)$ [– f. Fermionen-Variablensätze-Vertauschungen, + f. bosonische]

Diese Postulate $\hookrightarrow$ jene in Literatur (es sei denn letztere postuliert *zu viel*, wie z.B. "Idealmessungen"). Man prüfe nach, daß die in V. postulierte W.(dichte) aufgrund von IV. auf 1 normiert ist. Ψ gegeben $\Rightarrow$ zu sämtlichen Messungen A (operierend im Ψ-HR) die je zugehörige W.verteilung über a-Achse. Woher Ψ ? – warten, bis Grundzustand erreicht, und sodann $i\hbar\dot\Psi = H\Psi$ gezielt ausnutzen. Der Anfang der *Tabelle :*

$X\delta(x-a) \stackrel{!}{=} a\delta(x-a) \;\Rightarrow\; X = x\cdot$, $|\Psi(x)|^2 =$ W.dichte für x-Meßwerte ("Aufenthaltswahrscheinlichkeit") ; Exp.: p-EWe=$\hbar k$, $pe^{ikx} \stackrel{!}{=} \hbar k e^{ikx} \;\Rightarrow\; p = \frac{\hbar}{i}\partial_x$, normierte EFn zu EWn q : $\sqrt{\frac{1}{2\pi\hbar}}\,e^{i\frac{q}{\hbar}x}$, $P(q) = |\widetilde\Psi(\frac{q}{\hbar})|^2/2\pi\hbar$; $P\Psi(x) := \Psi(-x)$: EWe ±1 ; $\vec L = \vec r\times\vec p, L_3 = \frac{\hbar}{i}\partial_\varphi$ (EFn $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}$ zu EWn $\hbar m, m = 0,\pm1,\pm2,...$) , $[L_1,L_2] = i\hbar L_3$, $\vec L^{\,2} = -\hbar^2 r^2\Delta_{\vartheta\varphi} = -\hbar^2(\frac{1}{s}\partial_\vartheta s\partial_\vartheta + \frac{1}{s^2}\partial_\varphi^2)$, $s := sin(\vartheta)$ (EFn Y_{lm} zu EWn $\hbar^2 l(l+1)$, $l = 0,1,2,...$; $\eta_l = 2l+1$) ; $T = \vec p^{\,2}/2m = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, $\Delta = \frac{1}{r}\partial_r^2 r - \frac{\vec L^{\,2}}{\hbar^2 r^2}$. *Der* für die gesamte nichtrelativistische Q. ausreichende Hamiltonoperator ist $\frac{1}{2m}(\vec p - q\vec A)^2 + q\Phi$. ("Jedes V als $q\Phi$ herstellbar.")
Andere H's sind aus diesem zu kombinieren bzw. herzuleiten (Beispiel: Binden an Linie)!
Statik: $\Psi(x,t) \stackrel{!}{=} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\varphi_{E,\nu}(x) \Rightarrow H\varphi = E\varphi$. Dynamik: $\Psi(x,0)$ gegeben, $\Psi(x,t) = U(t)\Psi(x,0)$ mit im allg. $U(t) = T\,e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt' H(t')}$. Ebene Materiewelle: $e^{i(\vec k\vec r - \omega t)}$ mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$. 5 statische, 5 dynamische *Theoreme :*

① $< a >_\psi = \int da P(a) a = \int da \sum_\nu \int dy \varphi_{a\nu}(y)\Psi^*(y)\int dx \varphi^*_{a\nu}(x) A\Psi(x) = \int dx \Psi^*(x) A\Psi(x) =: < A >$
② $(\Delta A)_\psi\cdot(\Delta B)_\psi \geq \frac12 |< i[A,B] >_\psi|$ [$(\Delta x)\cdot(\Delta p) \geq \hbar/2$; = für Gauß -Fktn. ; $\Delta A := \sqrt{< (A - < A >)^2 >}$]
③ $[A,B] = 0 \;\Rightarrow$ es existiert ein simultanes EF-System (B schafft Ordnung im A-Entartungsunterraum.)
④ $H = f(H_1,H_2), [H_1,H_2] = 0 \;\Rightarrow\; H\varphi_{ab} = f(a,b)\varphi_{ab}$; Falls 1, 2 verschiedene Variable, dann $\varphi_{ab} = \phi_a(1)\cdot\chi_b(2)$ (Separation . – auch noch, wenn $H = f(H_1', H_1'', H_2)$)
⑤ E entartet $\Rightarrow$ es gibt (mindestens einen) nichttrivialen mit H vertauschbaren Operator. $[H,A] = [H,B] = 0$, $[A,B] \neq 0 \;\Rightarrow\; H$ *hat* Entartung. Bloch-, Virial-, optisches Theorem, ...
⑥ $\partial_t \int|\Psi|^2 = ... = 0, \Psi(x,t) =: U(t)\,\Psi(x,0) \;\Rightarrow\; U$ ist unitär : $U^\dagger U = 1$.
⑦ $|\Psi|^2 =: \rho$, $\dot\rho +$ div $\vec\jmath = 0, H = \frac{1}{2m}(\vec p - q\vec A)^2 + q\Phi \;\Rightarrow\; \vec\jmath = \frac{1}{2m}[\Psi^*(\vec p - q\vec A)\Psi + c.c.]$
⑧ $H = \text{const}_t$, $[H,A] = 0 \;\Rightarrow\; \partial_t P(a,t) = 0$; insbesondere *bleibt* Ψ H-EF, falls solche bei $t = 0$.
⑨ $\partial_t < A(t) >_\psi = \frac{i}{\hbar} < [H,A] >_\psi + < \dot A >_\psi$. (Ehrenfest. "$\dot x$ = ? " – Null !!)
⑩ $m\partial_t^2 < x >_\psi = ... =< K(x) >_\psi \;=\; K(< x >) + \frac12 K''(< x >)\cdot(\Delta x)^2 ....$ (exakt, wenn $K'' \equiv 0$)

All dies ist untrennbar verbunden mit einem gesunden Repertoire an streng lösbaren Beispielen: Kasten, Delta, Kreisring, harmon.Oszillator, Relativ- und Schwerpunkt, harmon.Molekül, Blochwellen, Dirac-Kamm, Rotator, $V(r), V_{eff}(r)$, H-Atom, q in $\vec B$ (Landau-Niveaus), R und D bzw. in 3D : $\sigma = i_{\text{aus}}/j_{\text{ein}}$, i_{aus} mit $f(\vartheta,\varphi)\cdot e^{ikr}/r$, zerfließendes Gauß-Paket, q in $\vec E$, Spin $\frac12$ und ideales Fermi- und Bose-System.

(hschulz@itp.uni-hannover.de)