

III) Quantenmechanik

①

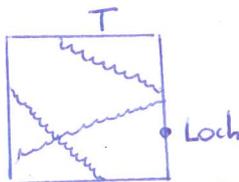
1) Historische Experimente und Widersprüche

a) Hohlraumstrahlung (Wärmestrahlung, Schwarzkörperstrahlung)

Abgeschlossener, idealisierter Raum mit Wänden auf Temperatur T

→ Wärmestrahlung wird ständig emittiert und absorbiert

→ Thermisches Gleichgewicht



Betrachtung des Strahlungsspektrums durch kleines Loch

Verteilung der Energie als Fkt. der Frequenz ν bei vorgegebener Temperatur T

→ spektrale Energiedichte $u_{\nu} = \frac{dE}{d\nu}$

Folgerung aus der klassischen Thermodynamik:

$u_{\nu} = f(\nu, T)$ mit universeller Funktion f , unabh. von Wänden, etc.

Klassische Ableitung:

Annahme: - Im Hohlraum bilden sich stehende Wellen aus!

- Die mittlere Energie im thermodynamischen Gleichgewicht ist $\bar{E} = k_B T$

Boltzmann-Konstante $k_B = 1.380648 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$

Abzählen der Wellen im Hohlraum (= Würfel mit Kantenlänge a):

1-dimensional:



Wellenlänge λ

Frequenz $\nu = \frac{c}{\lambda}$

$$\frac{\lambda}{2} \cdot n = a$$

↑
positiv und ganzzahlig

→

$$\nu = \frac{c}{2a} n$$

↳ diskrete Frequenzen

3-dimensional:

Wellenzahlvektor $\vec{k} = \frac{\pi}{a} \vec{n}$ mit $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$

$$\nu = \frac{c}{2\pi} |\vec{k}| = \frac{c}{2a} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}$$

mit $n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots$

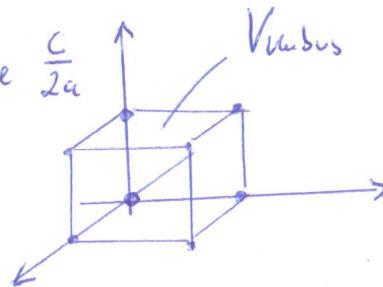
(trivial aus Pythagoras)

Frequenzraum ist kubisches Gitter mit Kantenlänge $\frac{c}{2a}$

Abzählen der Punkte im kubischen Gitter bis Maximalfrequenz ν :

$$N(\nu) \sim \frac{1}{8} \frac{V_{\text{Kugel mit Radius } \nu}}{V_{\text{Kubus mit } (\frac{c}{2a})^3}}$$

↳ nur Oktant wegen positiver n_i 's!



Dies liefert: $N(\nu) = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \nu^3 \left(\frac{2a}{c}\right)^3$

(2)

Anzahldichte: $\frac{dN(\nu)}{d\nu} = 4\pi a^3 \frac{\nu^2}{c^3}$ ← im Intervall $[\nu, \nu + d\nu]$

Energiedichte: Multiplikation von $\frac{dN(\nu)}{d\nu}$ mit \times mittlerer Energie $\bar{E} = k_B T$
 $\times 2$ wegen 2 Polarisationen
 \times dem inversen Volumen $1/a^3$

→ $w_\nu d\nu = \frac{dN(\nu)}{d\nu} \frac{2k_B T}{a^3} d\nu = 8\pi \frac{\nu^2}{c^3} k_B T d\nu$

Rayleigh-Jeans-Gesetz

Interpretation? → Gesamtenergie $E = \int_0^\infty w_\nu d\nu \rightarrow \infty$

Ultraviolett-Katastrophe

Wilhelm Wien (1893-96 relevante Experimente): empirisch

Beobachtung eines Maximums im Spektrum

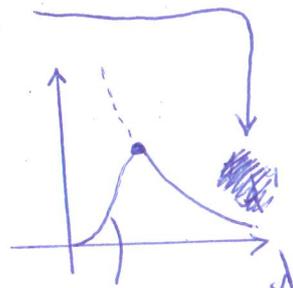
Wien'sches Verschiebungsgesetz

Wien'sches Strahlungsgesetz

$\frac{\nu_{max}}{T} = \text{konst.} \rightarrow \lambda_{max} \cdot T = \text{konst.}$

$w_\nu = a e^{-b \frac{\nu}{T}}$

Dämpfung für große ν / kleine λ !



Auflösung: Max Planck (1900)

Quantenhypothese: Atome der Wand können nur diskrete Energiepakete aufnehmen: $E_n = n \epsilon_0, n = 0, 1, 2, \dots$

Ableitung des Planck'schen Strahlungsgesetzes:

$N(n)$ Oszillatoren mit Energien E_n , so ist

$N = \sum_{n=0}^\infty N(n), E = \sum_{n=0}^\infty N(n) n \epsilon_0$

Statt $k_B T$ ist die mittlere Energie nun:

$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^\infty N(n) n \epsilon_0}{\sum_{n=0}^\infty N(n)}$

(vorher: E kontinuierlich $\rightarrow \bar{E} = \int_0^\infty dE E \frac{e^{-\beta E}}{k_B T} = k_B T$)

Anzahlverteilung folgt Boltzmann-Verteilung (~ 1860): $N(n) \propto e^{-\beta n \epsilon_0}$ mit $\beta = 1/k_B T$

Damit: $\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^\infty n \epsilon_0 e^{-\beta n \epsilon_0}}{\sum_{n=0}^\infty e^{-\beta n \epsilon_0}} = - \frac{d}{d\beta} \ln \left(\sum_{n=0}^\infty e^{-\beta n \epsilon_0} \right)$

Geometrische Reihe wegen $\epsilon_0, \beta > 0$:

$\sum_{n=0}^\infty e^{-\beta n \epsilon_0} = \sum_{n=0}^\infty \underbrace{(e^{-\beta \epsilon_0})^n}_{< 1} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \epsilon_0}}$

Damit folgt:

$$\bar{\epsilon} = \frac{\epsilon_0}{e^{\beta\epsilon_0} - 1} \neq k_B T$$

(3)

Ersetze $k_B T$ in Ableitung des Rayleigh-Jeans-Gesetzes durch $\bar{\epsilon}$:

$$\omega_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{\epsilon_0}{e^{\beta\epsilon_0} - 1}$$

Vergleich mit Wien hat Planck motiviert zu $\epsilon_0 = h\nu$

h Planck'sches Wirkungsquantum $\approx 10^{-33}$ Js

→ Planck'sche Strahlungsformel

$$\omega_\nu = \frac{8\pi\nu^3}{c^3} \frac{h}{e^{\beta h\nu} - 1}$$

Korrektes Grenzverhalten:

$$\frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \rightarrow \begin{cases} k_B T & \text{falls } h\nu \ll k_B T \text{ Rayleigh-Jeans} \\ h\nu e^{-\beta h\nu} & \text{falls } h\nu \gg k_B T \text{ Wien} \end{cases}$$

Integration über ν liefert endliches Resultat

$$\omega(T) = \left(\frac{8\pi^5}{15} \frac{k_B^4}{c^3 h^3} \right) T^4$$

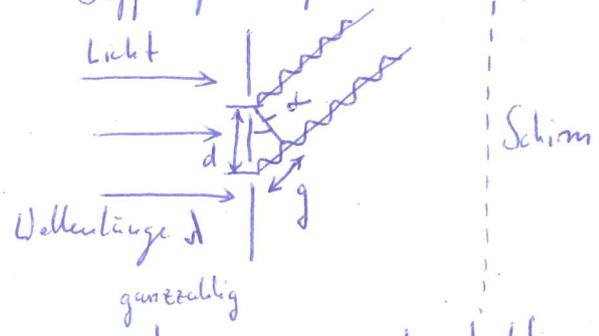
Stefan-Boltzmann-Gesetz.

b) Wellen-Teilchen-Dualismus

Phänomene, die auf den Teilchenschwaller von Lichtwellen und auf den Wellenschwaller von Teilchen hindeuten.

x Interferenz von Lichtwellen

→ Doppelspaltexperiment



kohärentes Licht
(= monochromatisch, hinreichend lange Wellenpakete)

ganzzahlig
↓
 $g = m \cdot \lambda$ → konstruktive Interferenz

$g = d \sin \alpha$ → $\sin \alpha = \frac{m \cdot \lambda}{d}$ Maxima der Intensität

→ Licht als Welle

(ähnliche Phänomene in Wasser, mit Schall, ...)

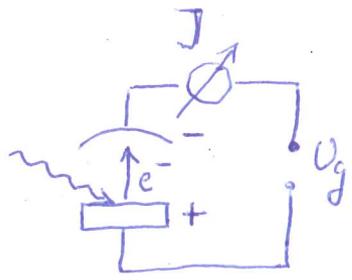
x Photoelektrischer Effekt

Heinrich Hertz, 1887, Karlsruhe!

Licht auf Kathode

→ Elektronen werden herausgeschlagen

Messung der Energie der Elektronen durch Variation von U_g (Feld zwischen Kath. und Anode)



$T = e U_g$ = kinetische Energie der Elektronen

Beobachtungen:

- Photoeffekt tritt nur für Photonen oberhalb einer Grenzf. ν_g auf.
- kinetische Energie der Elektronen hängt nur von ν ab, nicht von der Intensität des Lichts ↔ ∇ klassisches Feld
- $\nu > \nu_g$ → Anzahl der Elektronen proportional zur Intensität des Lichts
- Effekt erfolgt sofort bei $\nu > \nu_g$ → Elektronen sammeln keine Energie!

→ Lichtquantenhypothese (Einstein 1905)

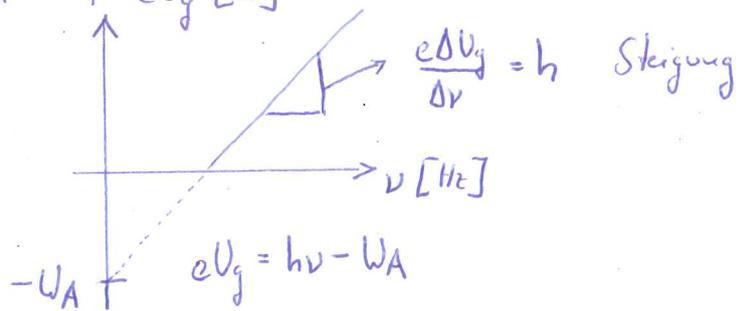
Licht = Ansammlung von Photonen der Energie $h\nu$

Einzelne Photonen lösen einzelne Elektronen heraus:

$h\nu = T + W_A$ ← materialabhängige Austrittsarbeit

Bestimmung von h und W_A : $T = eU_g [\text{eV}]$

Messung von U_g als Funktion von ν !



→ Licht als Teilchen

x Atomphysik

Rutherford'sches Atommodell (1911)

Negative Elektronen umkreisen planckmäßig den Atomkern
 $\sim 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ $\sim 1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$

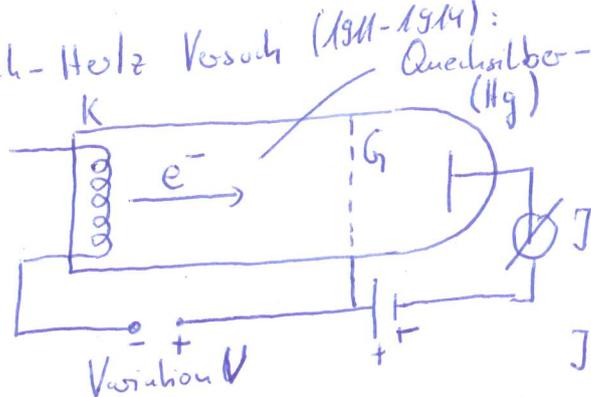
Erwartung: Emission von Lichtwellen durch beschl. Bewegung der Elektronen
 → Energieverlust → Elektronen ändern laufend die Umlauffrequenz
 → kontinuierliches Energiespektrum ~~versteht~~ bei Lichtabstrahlung

Beobachtung: diskrete Spektrallinien

z. B. Wasserstoffatom, Balmer-Linien $\nu \sim \frac{1}{\lambda} \sim \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}$
 mit n fest, $= 1, 2, 3, 4$; $m \geq n+1$

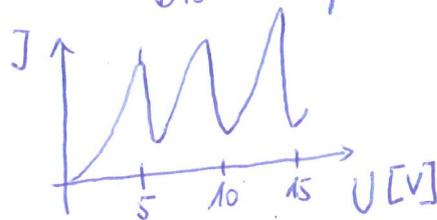
Niels Bohr (1913): - Elektronenbahnen solche, für die der Drehimpuls ein Vielfaches von $h = \frac{h}{2\pi}$ ist.
 - Emission und Absorption von Lichtquanten zwischen diesen diskreten Bahnen $h\nu = E_n - E_m$.

Franch-Hertz Versuch (1911-1914):



- Elektronen werden beschleunigt.
 Bei $V = 5 \text{ V}$ werden Hg-Atome erstmals angeregt.
 - Diskretes Spektrum:

- Abgestrahltes Licht hat Differenz der Energie zwischen Elektronenbahnen (ultraviolett)

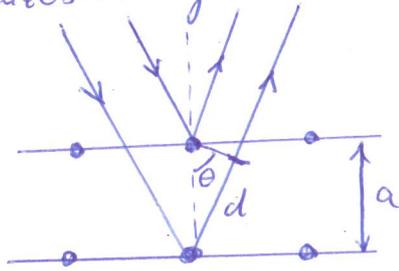


x Teilchenwellen

Beugungsexperimente von Davisson und Germer (1923)

Materiestrahl aus Elektronen auf Kristallgitter

→ Interferenzerscheinungen



$$\sin \theta = \frac{d}{a}$$

$$d = a \sin \theta$$

konstruktive Interferenz $2d = n\lambda \rightarrow 2a \sin \theta = n\lambda$
Bragg-Bedingung

Louis de Broglie:

Wellenlänge von Teilchen (de Broglie - Wellenlänge):

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Zuordnung eines Wellenzahlvektors entlang der Ausbreitungsrichtung:

$$\vec{h} \text{ mit } |\vec{h}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Dann ist: $\vec{p} = \hbar \vec{h}$ mit $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$

→ Elektron als Welle!

Deswegen: $E = h\nu$ bzw. $E = \hbar\omega$ mit $\omega = 2\pi\nu$
Kreisfrequenz

Somit: Materiewelle:

$$\vec{E} = \hbar \omega$$
$$\vec{p} = \hbar \vec{h}$$

$E \leftrightarrow \omega$
 $p \leftrightarrow \hbar k$
Teilchen Welle

[Achtung: $\nu = \frac{c}{\lambda}$ nur für Licht!]

2.) Wellen, Wellenpakete

(7)

a) Allgemeines

- Wellengleichung $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = 0$ lineare partielle DGL. 2. Ordnung

Phasengeschwindigkeit v

Allg. Lösung: $f(x, t) = f(x \pm vt)$ $\begin{cases} + \text{ links laufend} \\ - \text{ rechts laufend} \end{cases}$

- Superpositionsprinzip: $f_i(x, t) \rightarrow \sum_{i=1}^n c_i f_i(x, t)$ Lösung der DGL
 \rightarrow Existenz stehender Wellen, Interferenz, Beugung, Wellenpakete

Ebene, harmonische Welle

ein-dimensional: $f(x, t) = f_0 e^{i(kx \pm \omega t)}$

Wellenzahl $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

Weisfrequenz $\omega = 2\pi \nu$

Phasengeschwindigkeit: $v(k) = \frac{\omega}{k} = v \lambda$

Gruppengeschwindigkeit: $v_g(k) = \frac{d\omega}{dk}$

de Broglie - Beziehungen: $E = \hbar \omega$, $p = \hbar k$
 $\rightarrow v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\hbar \omega}{d\hbar k} = \frac{dE}{dp} = \begin{cases} \frac{p}{m} & \text{nicht-relativistisch} \\ \frac{pc^2}{E} & \text{relativistisch} \end{cases}$

nichtrelativistisch: $E = \frac{p^2}{2m}$

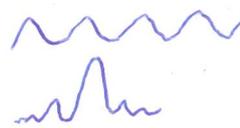
relativistisch: $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$
 $\rightarrow v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{pc^2}{E} = \frac{pc}{E} c = v$ $\begin{cases} E = \gamma m c^2 \\ p = \gamma m v \end{cases}$ (SRT)

Gruppengeschwindigkeit
 $\hat{=}$ Teilchengeschwindigkeit

b) Wellenpakete

bisher: nicht lokalisiert

von Relevanz: lokalisiert

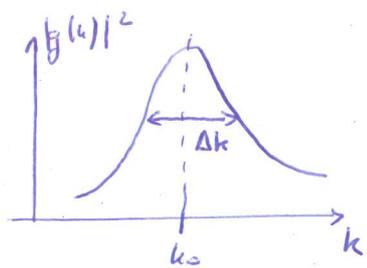


Beispiel: $f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{ikx}$ Fourierreintegral (motiviert aus Superpositionsprinzip)

Fourier transformiert $f(x) \leftrightarrow g(k)$

Wellenzahlverteilung: $g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$ Gauß-Verteilung

$|g(k)|^2 = e^{-2\alpha(k-k_0)^2}$



Breite: $|g(k_0 \pm \frac{1}{2} \Delta k)|^2 \stackrel{!}{=} |g(k_0)|^2 / e$ (Definition)
 $e^{-2\alpha \frac{1}{4} \Delta k^2} = e^{-1} \rightarrow \Delta k = \frac{2}{\sqrt{2\alpha}}$

Ortsverteilung: $f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx}$ Substitution $k' = k - k_0$
 $dk' = dk$
 $= \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{-\alpha k'^2} e^{ik'x} e^{ik_0 x}$
 $= e^{ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} dk' e^{-\alpha(k'^2 - \frac{ix}{\alpha} k')}$
 $= e^{ik_0 x} \int_{-\infty}^{\infty} dk'' e^{-\alpha k''^2} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} e^{ik_0 x}$ Substitution $k'' = k' - \frac{ix}{2\alpha}$
 $dk'' = dk'$
 $= \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} e^{ik_0 x}$

$\rightarrow |f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}$

Breite: $|f(\pm \frac{\Delta x}{2})|^2 \stackrel{!}{=} \frac{\pi}{\alpha} \frac{1}{e} \rightarrow \Delta x = 2\sqrt{2\alpha}$

Es ist: $\Delta k \cdot \Delta x = \frac{2}{\sqrt{2\alpha}} \cdot 2\sqrt{2\alpha} = 4$ unabhängig von α !
 $= O(1)$

(Vorfänger der Heisenberg'schen Unschärferelation)

c) Zeitliche Evolution von Wellenpaketen
 $f(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{i(kx - \omega t)}$ Superposition von Wellen: $\Sigma \rightarrow \int FT!$
 $= \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{ik(x - \frac{\omega}{k} t)}$
 $= f(x - vt)$
 \downarrow
 $= v$
 Phasengeschw. der individuellen Welle

(i) v unabhängig von k (unveränderliche relative Phase)

* Lichtwelle $v = \frac{\omega}{k} = v \lambda = c$

Beispiel: $g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$
 $\rightarrow f(x,t) = f(x-ct) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\frac{(x-ct)^2}{4\alpha}} e^{ik_0(x-ct)}$

Laufende Gaußverteilung mit $\Delta x = c \Delta t$

* Propagation des Wellenpakets mit Gruppengeschwindigkeit v_g

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(vk)}{dk} = v + k \frac{dv}{dk} = v = c$$

* keine Dispersion (d.h. Änderung des Form des Wellenpakets) da $\frac{dv}{dk} = 0$

(ii) v abhängig von k (veränderliche relative Phase)

* Materiewelle (de Broglie - Beziehung) $E = \hbar\omega, p = \hbar k$

nicht-relativistisch: $\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m} \rightarrow v = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$
 $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m}$

$$f(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}$$

Taylorentwicklung: $\omega(k) = \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2m}} + (k-k_0) \underbrace{\frac{d\omega}{dk} \Big|_{k_0}}_{v_{g_0} = \frac{\hbar k_0}{m}} + \frac{1}{2} (k-k_0)^2 \underbrace{\frac{d^2\omega}{dk^2} \Big|_{k_0}}_{2\beta = \frac{\hbar}{m}} + \dots = 0$

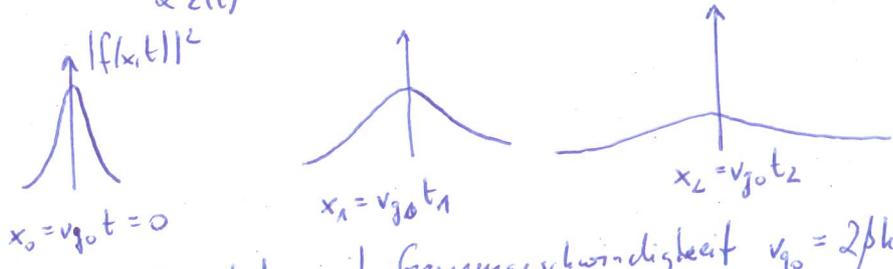
$$= \omega_0 + v_{g_0} (k-k_0) + \beta (k-k_0)^2$$

Nach etwas Rechnung folgt:

$$f(x,t) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}} e^{-\frac{(x - v_{g_0}t)^2}{4(\alpha + i\beta t)}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$$

$$\rightarrow |f(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{\pi^2}{\alpha^2 + \beta^2 t^2}} e^{-\frac{1}{4}(x - v_{g_0}t)^2 \left(\frac{1}{\alpha + i\beta t} + \frac{1}{\alpha - i\beta t} \right)}$$

$$= \frac{\pi}{\alpha \epsilon(t)} e^{-\frac{(x - v_{g_0}t)^2}{2\alpha \epsilon(t)^2}} \quad \text{mit } \epsilon(t) = \sqrt{1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2} t^2}$$



* Propagation des Wellenpakets mit Gruppengeschwindigkeit $v_{g_0} = 2\beta/k_0 = \frac{\hbar k_0}{m}$

* Auseinanderlaufen des Wellenpakets mit t

$$f(v_{g_0}t, t) = \frac{\pi}{\alpha \epsilon(t)}$$

Höhe des Maximums \downarrow mit t

$$\Delta x = 2\sqrt{2\alpha} \epsilon(t)$$

Breite \uparrow mit t

\rightarrow Dispersion mit $\frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{2m} = \beta!$

3.) Schrödingergleichung

(10)

a) Motivation / Herleitung aus der Wellengleichung (historisch)

Betrachte Wellenpaket $f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{i(kx - \omega t)}$

* de Broglie Beziehungen: $h = \frac{p}{\hbar}$, $\omega = \frac{E}{\hbar}$

$$\rightarrow f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\hbar} \underbrace{g\left(\frac{p}{\hbar}\right)}_{\rightarrow \phi(p)} e^{+i\frac{p}{\hbar}(px - Et)}$$

Definire: $\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) e^{+i\frac{p}{\hbar}(px - Et)}$

* Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ erfüllt die DGL:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p) \underbrace{\left(i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} E \right) \right)}_{\substack{= E = \frac{p^2}{2m} \\ \text{nicht rel.}}} e^{+i\frac{p}{\hbar}(px - Et)}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

← Dies erhält man durch 2. Ableitung des Exponentialfkt. nach x!

$$\rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi(x,t)$$

Schrödingergleichung (Erwin Schrödinger, 1926)

- Annahmen:
- eindimensionale Wellengleichung
 - freies Teilchen (kein äußeres Potential V)
 - nicht-relativistisch! $\rightarrow E = \frac{p^2}{2m}$

↔ relativistische Variante: Dirac-Gleichung

Hinzunahme Potential tatsächlich durch Ersetzung $E \rightarrow E+V = \frac{p^2}{2m} + V$.

Dann: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + V \right] \Psi(x,t)$

b) Motivation aus der klassischen Mechanik

Hamilton-Formalismus: $H(q, p, t) = \dot{q}p - L(q, \dot{q}, t)$ mit $\dot{q} \rightarrow p$

(11)

Bewegungsgleichungen: $\frac{\partial H}{\partial p} = \dot{q}$, $\frac{\partial H}{\partial q} = -\dot{p}$

Kanonische Transformation $(q, p) \rightarrow (\tilde{q}, \tilde{p})$, so dass

$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{p}} = 0 \rightarrow \tilde{q} = \text{konst.}$, $\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{q}} = 0 \rightarrow \tilde{p} = \text{konst.}$

Die zugehörige Erzeugende dieser Transformation S erfüllt die Hamilton-Jacobi-DGL:

$H(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$

Interpretation: Ausbreitung von Punktteilchen durch Wirkungswellen (= Wirkungsfunktion S).

Dies motiviert: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H \Psi(\vec{r}, t)$

Hamilton-Operator analog zur Hamilton-Funktion der klassischen Mechanik:

$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$

Vergleich mit der Gleichung aus (a) impliziert: Impulsoperator $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ mit dem Gradienten $\vec{\nabla} = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})^T$!

Diese "Ortsdifferential" des Impulsoperators werden wir später noch genauer betrachten. Sie ist auch motiviert über das Noether-Th.: Translationsinvarianz \Leftrightarrow Impulserhaltung

Dann: $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t)$ dreidimensional

c) Interpretation der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ bzw. $\Psi(x, t)$ (eindimensional)

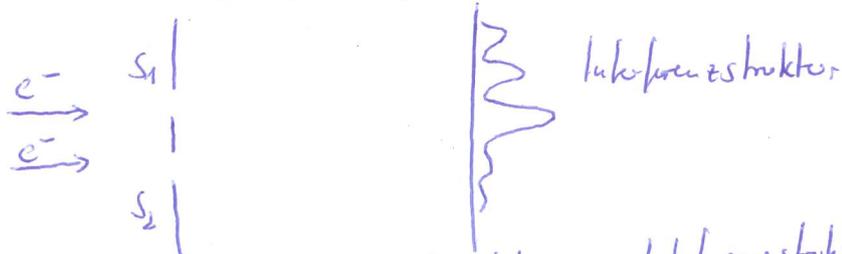
$|\Psi(x, t)|^2$ kann nicht mit der physischen Ausdehnung von Teilchen assoziiert werden.

Quantenmechanik: $|\Psi(x, t)|^2 dx =$ Wahrscheinlichkeit, das fragliche Teilchen zur Zeit t im Intervall $[x, x+dx]$ zu finden

$\int_{x_1}^{x_2} dx |\Psi(x, t)|^2 =$ Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Intervall $[x_1, x_2]$ zu finden bei vorgegebener Zeit t

Wahrscheinlichkeitsdichte
dreidimensional: $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$

Motivation: Doppelspaltexperiment



- funktioniert auch bei geringer Intensität \rightarrow Interferenzstruktur als Histogramm einzelner Detektorblöcke!
- Beobachtung bei S_1 oder S_2 zerstört Interferenzstruktur
- \rightarrow Elektron behält seine Teilchennatur, trotz Interferenzeffekts
- \leftrightarrow Wellenfunktion $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ wird als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert.

d) Unschärfebeziehung

Wellenpaket $\Delta x \Delta k = \mathcal{O}(1)$, d.h. $\Delta x \Delta p = \mathcal{O}(\hbar)$

$\hbar \sim 10^{-34} \text{ Js}$

Beispiel: - Wassertropfen mit Radius $r = 10^{-2} \text{ m}$
 $p = 4 \cdot 10^{-6} \text{ g} \cdot 10 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$ Annahme: $\frac{\Delta p}{p} = 10^{-4}$

$\rightarrow \Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta p} \approx 10^{-19} \text{ cm} = 10^{-17} \text{ r}$
 \rightarrow vernachlässigbare Ortsunschärfe

- Elektron auf Bohr'scher Bahn (Wasserstoff):

$\Delta x \sim \frac{\hbar}{\Delta p} \sim \frac{n+1}{n} R_n$

\rightarrow Ortsunschärfe ähnlich groß wie Radius!

Komplementarität von Energie und Zeit: $\Delta E \cdot \Delta t = \mathcal{O}(\hbar)$

Motivation:

- Plausibilität: $\rightarrow \left(\frac{m \Delta x}{\hbar} \right) \left(\frac{\hbar \Delta p}{m} \right) = \mathcal{O}(\hbar)$

- Wellenpaket: $e^{i/\hbar (px - Et)}$ $\begin{matrix} p \leftrightarrow x \\ E \leftrightarrow t \end{matrix}$

- SRT: $x^\mu = (ct, \vec{x})$, $p^\mu = (\frac{E}{c}, \vec{p})$

Anmerkung: Für Wellenpaket gilt $\Delta x \Delta p \geq \mathcal{O}(\hbar)$
 \uparrow siehe Übung Blatt 9, Dispersion

c) Eigenschaften der Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ bzw. $\Psi(x, t)$

Eindimensionale Diskussion führt auf 3 Dimensionen übertragbar!

(i) - Wahrscheinlichkeitsinterpretation: $|\Psi(x, t)|^2 dx$
Wahrscheinlichkeitsdichte

Daher muss gelten: $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 = 1$

→ Somit muss $\Psi(x, t)$ eine quadratintegrierbare Funktion sein!

Insbesondere: Ebene, nicht lokalisierte Welle nicht normierbar!

→ $\Psi(x, t)$ muss ein lokalisiertes Wellenpaket sein!
 $\Psi(x \rightarrow \pm\infty, t) \rightarrow 0$

- $\Psi(x, t)$ sei stetig in x .

(ii) Globale Phasen sind irrelevant, aber relative Phasen nicht!

$\Psi'(x, t) = e^{i\varphi} \Psi(x, t) \rightarrow |\Psi'(x, t)|^2 = |\Psi(x, t)|^2$

Superposition: $\Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)$

ebenfalls Lösung der Schrödingergleichung als lineare Wellengleichung

→ $|\Psi(x, t)|^2 = |\Psi_1(x, t)|^2 + |\Psi_2(x, t)|^2 + \Psi_1^* \Psi_2 + \Psi_1 \Psi_2^*$

Mit $\Psi_1 = |\Psi_1| e^{i\alpha_1}$ und $\Psi_2 = |\Psi_2| e^{i\alpha_2}$ folgt:

$$|\Psi(x, t)|^2 = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2 + \underbrace{2 |\Psi_1| |\Psi_2| \operatorname{Re} e^{i(-\alpha_1 + \alpha_2)}}_{= 2 |\Psi_1| |\Psi_2| \cos(\alpha_2 - \alpha_1)}$$

→ Interferenz, z.B. beim Doppelspaltexperiment

(iii) Wahrscheinlichkeitserhaltung $P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^* \Psi$

$$\frac{dP(x, t)}{dt} = \frac{d}{dt} (\Psi^* \Psi) = \frac{d\Psi^*}{dt} \Psi + \Psi^* \frac{d\Psi}{dt}$$
$$= \left(\frac{\hbar}{2im}\right) \frac{d^2\Psi^*}{dx^2} \Psi + \Psi^* \left(-\frac{\hbar}{2im}\right) \frac{d^2\Psi}{dx^2}$$

↑
Schrödingergl. (eind., freies Teilchen)

$$= -\frac{d}{dx} \left[\frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \frac{d\Psi^*}{dx} \Psi \right) \right]$$

→ Kontinuitätsgleichung: $\frac{dP(x, t)}{dt} + \frac{dj(x, t)}{dx} = 0$

mit $j(x, t) = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dx} - \frac{d\Psi^*}{dx} \Psi \right)$

Wahrscheinlichkeitsstrom

Konsequenz:

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} dx P(x,t) = - \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{dj(x,t)}{dx} = j(x_1,t) - j(x_2,t)$$

→ Änderung der Wahrscheinlichkeit bedingt Strom aus diesem Gebiet!

$$x_1 \rightarrow -\infty, x_2 \rightarrow \infty : \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} dx P(x,t) = j(-\infty,t) - j(+\infty,t) = 0$$

wegen (i)!

$$\text{Folglich: } \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x,0)|^2 = 1$$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x,t)|^2 = 1$$

Normierte Wellenfunktion bleibt normiert! Wahrscheinlichkeitserhaltung ist gegeben!

4.) Operatoren und Kommutatoren (eindim. Diskussion)

a) Orts- und Impulsoperator

Bei gegebener Wahrscheinlichkeitsdichte ergibt sich der Ortsbewegungswert nach

$$\langle x \rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} dx \ x P(x,t)$$

↑
zeitabhängig

Wie ist der Impulsbewegungswert $\langle p \rangle_t$?

klassisch, nicht-relativistisch: $p = mv = m \frac{dx}{dt}$

Ausatz: Ehrenfest-Theorem $\langle p \rangle_t = m \frac{d\langle x \rangle_t}{dt}$

Dies liefert:

$$\langle p \rangle_t = m \frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \ x \psi^*(x,t) \psi(x,t) \right)$$

$$= m \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[x \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi + x \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right]$$

$$= m \int_{-\infty}^{\infty} dx \left\{ \frac{\hbar}{2im} \left[\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi - \psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] \right\}$$

reell!
↓
 $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \psi + V\psi$

Nebenrechnung: $\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} x \psi = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi \right) - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \psi}{\partial x}$

$\psi^* x \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \psi}{\partial x}$

$$\rightarrow \langle p \rangle_t = \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi - \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right]$$

$$= \frac{\hbar}{2i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left[\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi - \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \psi^* \psi \right\} + 2 \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right]$$

$$= \frac{\hbar}{2i} \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x} x \psi - \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi^* \psi \right]_{-\infty}^{\infty} + \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

= 0 falls ψ normiert!

Daher: $\left. \begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \psi(x,t)^* x \psi(x,t) \\ \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \psi(x,t)^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \end{aligned} \right\} \langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$

Dies motiviert erneut: Impulsoperator $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Operator: Abbildung einer Funktion $\psi(x)$ auf eine Funktion $O\psi(x)$, die durch eine Rechenvorschrift aus $\psi(x)$ bestimmt wird:

Ortsoperator: $\psi(x) \rightarrow x\psi(x)$

Impulsoperator: $\psi(x) \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$

Häufige Notation \hat{x}, \hat{p}
 $\hat{x} = X, \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

b) Darstellungen:

Bisher arbeiten wir in der Ortsdarstellung mit $\Psi(x, t)$.

Alternativ können wir auch im Impulsraum \leftrightarrow Impulsdarstellung mit $\phi(p, t)$ arbeiten.

Dort ist: $\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p, t)^* p \phi(p, t)$

$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp \phi(p, t)^* [it\hbar \frac{d}{dp}] \phi(p, t)$

Somit: $\hat{x} = it\hbar \frac{d}{dp}, \hat{p} = p$

→ Viele Probleme der QM können in verschiedenen Darstellungen ausgedrückt werden.

→ Hilbertraum, siehe später.

c) Kommutator:

Für zwei Operatoren \hat{A} und \hat{B} definieren wir den Kommutator $[\hat{A}, \hat{B}]$

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

Verschwand dieses, so sagt man: Die Operatoren vertauschen/kommutieren!

Anmerkung: In der Ortsdarstellung ergänze man gedanklich immer $\Psi(x, t)$, auf welches der Kommutator wirkt.

Für Orts- und Impulsoperator folgt:

$\hat{x}\hat{p}\Psi(x, t) = x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \Psi(x, t)$

$\hat{p}\hat{x}\Psi(x, t) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (x\Psi(x, t)) = \frac{\hbar}{i} x \frac{d\Psi}{dx} + \frac{\hbar}{i} \Psi$

→ $[\hat{p}, \hat{x}]\Psi(x, t) = (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})\Psi(x, t) = \frac{\hbar}{i} \Psi(x, t)$

Es ist also: $[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}$

dreidimensional: $[\hat{p}_i, \hat{x}_j] = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}$ oder $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = it\hbar \delta_{ij}$

Zu Vergleich mit der Poisson-Klammer der Mechanik: $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$

→ Der Kommutator erfüllt Rechenregeln wie die Poisson-Klammer, insbesondere

Produktregel $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$

Verallgemeinerte Unschärferelation:

$\langle \hat{A} \rangle = \int dx \Psi^* \hat{A} \Psi$
 $\Delta A^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$

Definiere als Maß für Unschärfe: (siehe Varianz in der Statistik)

Dann: $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} | \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle |$

siehe Blatt 9!

Beispiel: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar$

d) Hermitesche Operatoren und Observable

* Operatoren \hat{x} und \hat{p} haben reelle Erwartungswerte für alle zulässigen Wellenfunktionen Ψ

(i) $\langle \hat{x} \rangle^* = (\int dx \Psi^* x \Psi)^* = \langle \hat{x} \rangle$

(ii) $\langle \hat{p} \rangle^* = (\int dp \phi^* p \phi)^* = \langle \hat{p} \rangle$

↑ im Impulsraum, Beweis im Ortsraum braucht $\Psi^* \Psi \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$

* Operatoren, deren Erwartungswert reell sind, heißen hermitesch!

* Jeder beobachtbaren Größe wird ein hermitescher Operator zugeordnet.
↳ Observable

Die Meßwerte entsprechen den Eigenwerten des Operators, siehe nachfolgendes Kapitel! Der Erwartungswert bestimmt sich aus den Eigenwerten, gewichtet mit Wahrscheinlichkeiten.
hermitescher Operator \leftrightarrow reelle Eigenwerte

Wichtige Operatoren in der Ortsdarstellung (dreidimensional):

Ort: $\hat{r} = \vec{r}$

Impuls: $\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}_r$

Drehimpuls: $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p} = \hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}_r$

Hamilton: $\hat{H} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}_r^2}_{\text{Operator für kinetische Energie}} + V(\vec{r})$

e) Zusammenfassung

* Zustand eines Systems wird durch Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}, t)$ beschrieben!

* Zeitentwicklung ist durch Schrödingergleichung

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t)$

bestimmt. $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ wird als Wahrscheinlichkeitsdichte verstanden, die normiert bleibt.

* Meßgrößen werden hermitesche Operatoren zugeordnet, z. B. \hat{x}, \hat{p} .
Deren Erwartungswerte und deren Eigenwerte sind reell:

$\hat{A} \Psi = a \Psi$ (siehe nachfolgend) } $a, \langle \hat{A} \rangle$ sind reell.
 $\langle \hat{A} \rangle = \int d^3\vec{r} \Psi(\vec{r}, t)^* \hat{A} \Psi(\vec{r}, t)$