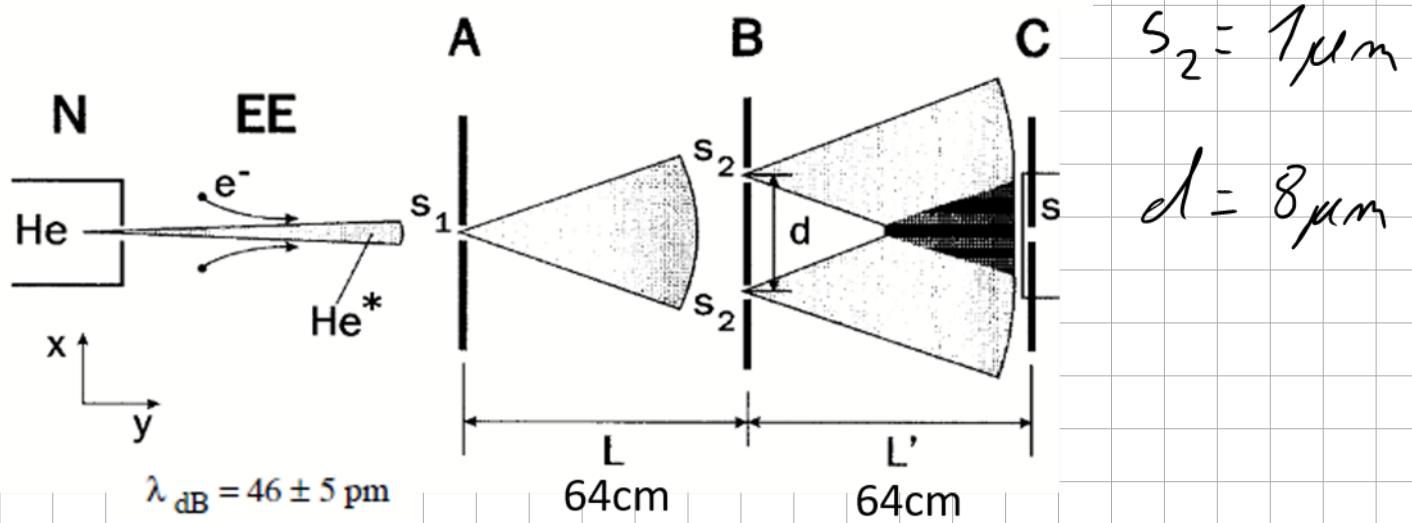


# 7.3 Materiewellen / QM - Grundlagen

Quantenmechanik ist motiviert / gerechtfertigt durch exp. Beobachtungen.

Ein Beispiel (von vielen):

O. Camal, J. Mlynek, PRL 66, 2689 (1991)



Doppelspalt - Versuch mit einzelnen<sup>(\*)</sup> He - Atomen

$$(*) \text{ He - Fluss} = \frac{\text{Teilchen}}{\text{Zeit}} \ll \frac{1}{\text{Energiet Quelle} \rightarrow \text{Schirm}}$$

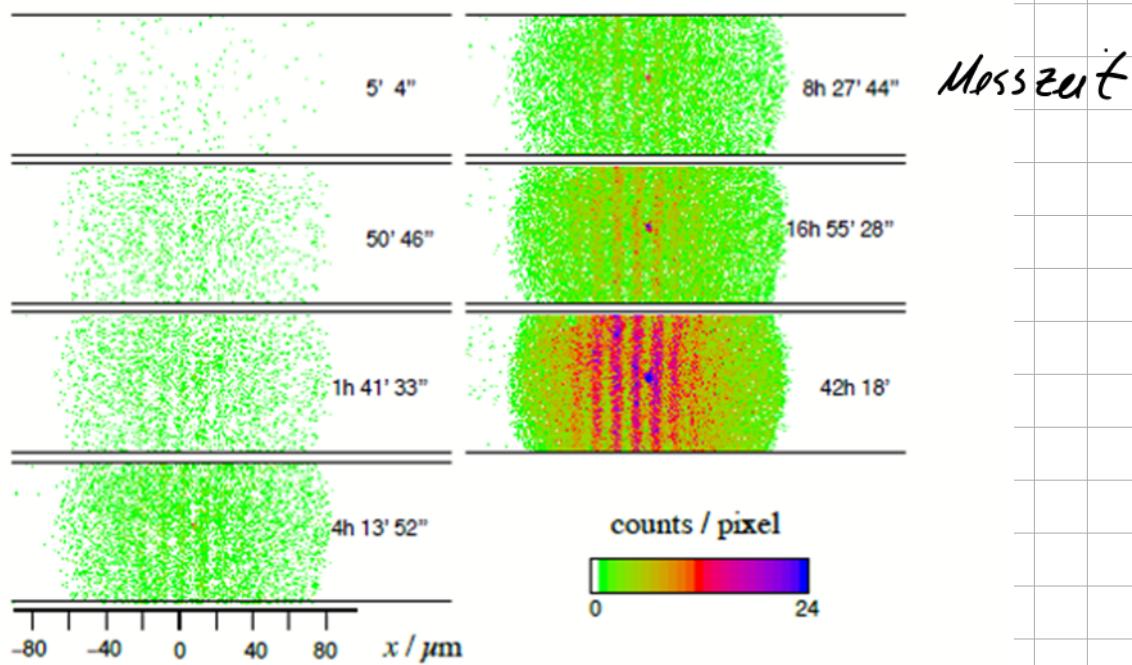
(Nahpeu) immer nur ein He - Atom im Interferometer

Startbedingungen für jedes einzelne Atom sehr gut kontrolliert:

Ort: Austritt des Einzelspalt

Geschwindigk.:  $v_L$  limitiert durch Spaltbreite

Signal auf dem Schirm:



Ch. Kurtsiefer, T. Pfau, J. Mlynek

Wie beim Photonen-Interferometer:

- ① einzelne, diskrete "events" auf dem Schirm
- ② Viele identische Messungen (Ensemble-Messung)  
liefern Interferenzmuster
- ③ Wiederholung der Ensemble-Messung  
ergibt immer wieder gleiches Muster.  
ABER: Ruhenspurge / Orte einzeln  
Atom- "events" folgt nur der Ensemble-  
Wahrscheinlichkeit

② und ③ sind mit klass. Physik nicht  
verträglich!

⇒ fundamental neuer Ansatz nötig

Hypothesen und Postulate der Quantenmechanik:

1) Materie zeigt Welleneigenschaften

⇒ anstelle der klass. Trajektorie  $\vec{r}(t)$   
und Geschwindigkeit  $\vec{v}(t)$  wird  
die Dynamik eines Teilchens beschrieben  
durch die Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$

- $\psi(\vec{r}, t)$  i. A. komplex  
 $\Leftrightarrow$  nicht direkt messbar

2) Anstelle der klass. Bewegungsgleichungen

wird die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion  
beschrieben durch die Schrödingergleichung:

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

- $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  reduzierte Planck-Konstante
- $m$  = nichtrelativistische Masse des  
Teilchens

$$\cdot \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{"Laplace-Operator"}$$

- $V(\vec{r}, t) =$  (klass. Potential  
 $\Leftrightarrow$  externe Kräfte)

3) Bei einer Messung - z.B. dem Auftreffen auf einem Leuchtschirm - wird das Teilchen an einem Ort  $\vec{r}$  zur Zeit  $t$  registriert<sup>(\*)</sup>.

(\*) genauer: in einem Zeitraum  $\Delta t$  und Volumen  $\Delta \vec{r}$   
 ergeben durch Zeit- und Orts-Auflösung des Detektors

$\Rightarrow$  Borns Regel (1926):

$$P(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^* \cdot \Psi$$

ist die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zur Zeit  $t$  am Ort<sup>(\*)</sup>  $\vec{r}$  zu finden.

(\*) genauer: in einem infinitesimal kleinen Volumen  $d\vec{r}$  um den Punkt  $\vec{r}$

$P(\vec{r}, t) \stackrel{!}{=} \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}$

$$\Leftrightarrow \int P(\vec{r}, t) d\vec{r} = \int \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t) d\vec{r} = 1$$

$\Leftrightarrow$  Für "gut" (= phys. sinnvolle) Wellenfunktionen:

$\psi(\vec{r}, t)$  quadratintegrabel

$$\Leftrightarrow \vec{r} \rightarrow \infty : \frac{\psi(\vec{r}, t)}{P(\vec{r}, t)} \rightarrow 0$$

Teilchen ist in einem endlichen Volumen  
zu finden

Anwenden dieser Postulate auf das Experiment

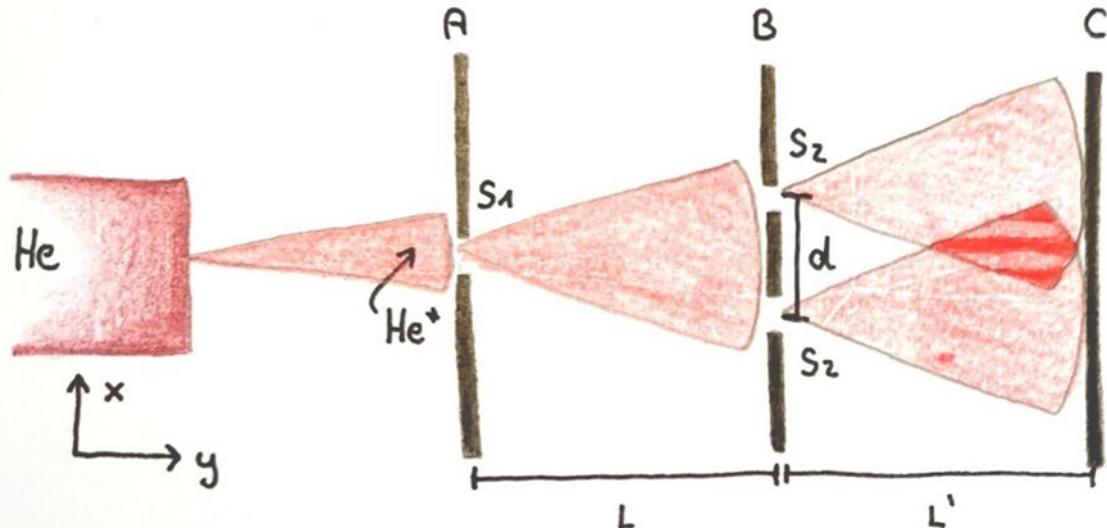
1) Der Anfangszustand eines  $H\alpha$ -Atoms am  
Eingang des Interferometers = Ausgang eines Oszs -  
 wird beschrieben durch ein Wellenpaket

$$\psi(\vec{r}, t=0)$$

mit räumlicher Ausdehnung ( $\psi(\vec{r}, t=0) \neq 0$ )  
gegeben durch die

$$\text{de Broglie-Wellenlänge } \lambda_b = \frac{h}{p} \sim 50 \text{ pm}$$

2) Die Ausbreitung dieses Wellenpakets hinter dem Einzelspalt wird beschrieben durch die Schrödinger-Gl. mit  $V(\vec{r}) = 0$



Insbesondere können wir berechnen:

$$\Psi(x, y=13, z)$$

3) Der Doppelspalt führt eine "Messung" durch

$\Rightarrow$  Postulat 3 / Teilchenbild:

- Das Atom prallt mit Wahrscheinlichkeit

$$P_w(x_w, y=13, z, t) = |\Psi(x_w, 13, z, t)|^2$$

$x_w \hat{=} \text{abgedeckter Bereich}$

gegen die Wand  $\Rightarrow$  dieses Atom erreicht den Schirm nicht

- Mit Wahrscheinlichkeit  $1 - P_w$  erreicht das Atom den Schirm

4) zurück zum Wellenbild:

für diese (kleine) Anzahl an Experimenten entwickelt sich das Wellenpaket weiter nach der Schrödinger-Gl.

Die ist homogen und linear

$$\Rightarrow \text{Superposition } \Psi = \alpha \Psi_1 + \beta \Psi_2$$

von Lösungen sind auch Lösungen

hier (wie bei Licht):

$$\Psi_{DS} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{\text{Links}} + \Psi_{\text{Rechts}})$$

Wellenfunktion nach dem Doppelspalt

hat 2 Beiträge, jeweils die Anteile des Ausgangspakets, welche ungestört durch einen der 2 Spalte geläufen ist.

5) Das Auftreffen auf dem Schirm ist wieder eine Messung  $\Rightarrow$  Postulat 3

$$P(x, l, z, t) dx dz$$

$$= |\Psi_L(x, l, z, t) + \Psi_R(x, l, z, t)|^2 dx dz \in [0..1]$$

Wahrscheinlichkeit des Auftreffens des Schirms im Bereich  $x, z$  (zur Zeit  $t$ )

$\Rightarrow$  Interferenz (wie bei Licht) durch  
Weglängen - Unterschied der zwei Teilwellen

Zentrale Aspekte:

- Schrödinger-Gl. ist DGL 1. Ordnung:  
die Zeitentwicklung des Zustands  $\psi(\vec{r}, t)$  ist  
**DETERMINISTISCHE**  
 $\Leftrightarrow$  die Startbedingung  $\psi(\vec{r}, t=0)$  legt  
den Zustand für alle Zeiten und Orte fest  
(vergl. klassische Mechanik: 2 (reelle) Startbed.)  
 $\vec{r}(t=0), \vec{v}(t=0) = \dot{\vec{r}}$

Insbesondere ist

$$P(x, z, t) dx dz$$

exakt gegeben durch  $\psi(\vec{r}, t=0)$

- für den Auftreffpunkt eines einzelnen Atoms  
macht der Formalismus nur eine  
**PROBABILISTISCHE** Aussage

$\Rightarrow$  QM sagt nur die Wahrscheinlichkeit  
von beobachtbaren Ereignissen voraus

Frage: Was ist ein Ereignis / eine Messung?

(Vorlesung) steht vereinfacht:

Kontakt des QM-Wellenpackets

mit der klassischen/makroskopischen Umgebung,

z. B. einem Detektor

### 1.3.1 Dispersion und Umschaufl

Betr. freies Teilchen:  $V(\vec{r}) = 0$

einfachste Lösung der SGL

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t)$$

sind ebene Wellen

$$\psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-i(Et - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

• de Broglie:  $\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow \vec{p} = \hbar \vec{k}$

• inspiriert von Photonen:  $E = h\nu$

$\Rightarrow$

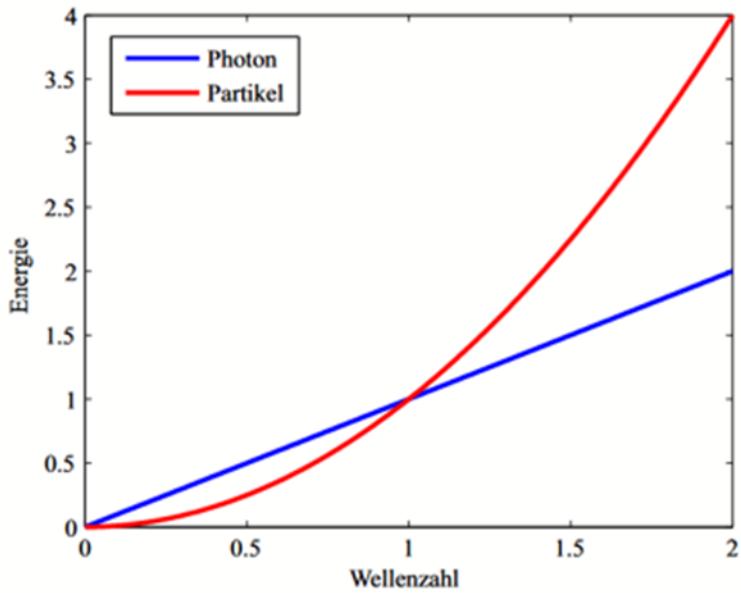
$$\psi_{\text{nr}}(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-i(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

ebene Materiewelle

einsetzen in SGL gibt

$$E = \frac{(\vec{p} \cdot \vec{\lambda})^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

Dispersionsrelation  
(quadratisch)



Aber: Ebene Welle ist nicht normierbar  
(genauso wie in der Optik)

$$|\psi_{\text{ww}}|^2 = A^2 = \text{const}$$

$\Rightarrow$  keine phys. sinnvolle Wellenfkt.

Linearität der SGL  $\Rightarrow$

"

Wellenpaket als Überlagerung einiger  
Wellen:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3\vec{\lambda} A(\vec{\lambda}) e^{-i(w(\vec{\lambda}) \cdot t - \vec{\lambda} \cdot \vec{r})} \quad (*)$$

erlaubt räumliche Lokalisierung der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = P(\vec{r}, t) d\vec{r}$$

Eindimensionales Beispiel:  $(\vec{r} \rightarrow x, \vec{k} \rightarrow k)$

Gaußpaket für Wellenzahlen

$$A(k) = \frac{\sqrt{\sigma}}{(2\pi)^{3/4}} e^{-\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2 (k-k_0)^2}$$

in (1) liefert:

$$\psi(x, t=0) = \left(\frac{2}{\pi\sigma^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} e^{ik_0 x}$$

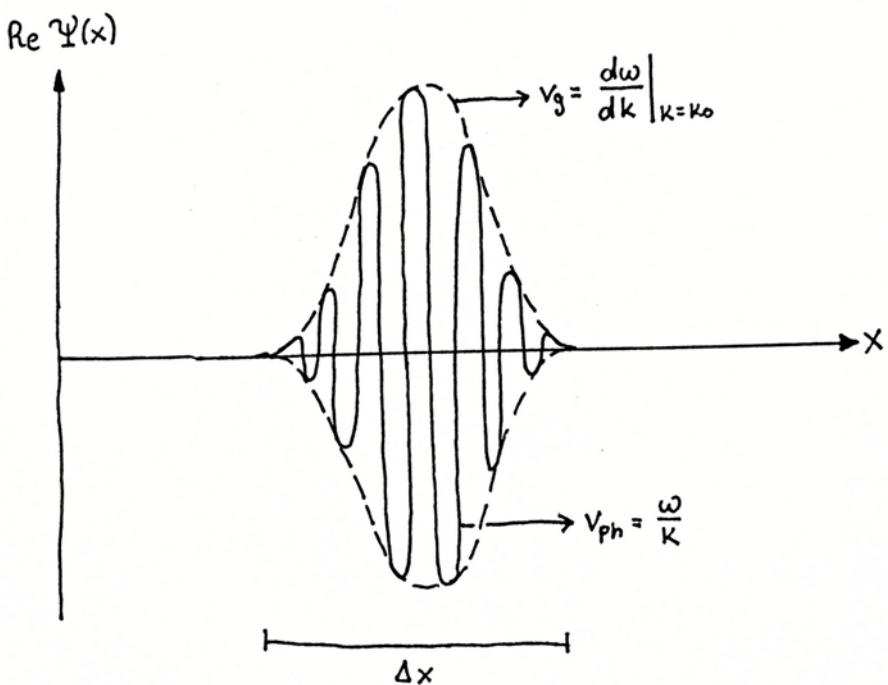
"Räumliche Ausdehnung"  $\Delta x = \sigma$

erfordert Wellenzahl/Impulsverteilung  $\Delta k = \frac{1}{\sigma}$

$$\Rightarrow \Delta x \cdot \Delta k = 1 \Leftrightarrow \Delta x \cdot \Delta p = \hbar$$

Wellenmechanik (wie Optik) führt zu "Umschärfe" in Ort und Impuls

Bem.:  $A(k)$  ist die Fouriertransformation von  $\psi(x, 0)$



Aus der Dispersionsrelation  $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$   
folgt:

Phasengeschw.

Gruppengeschw.

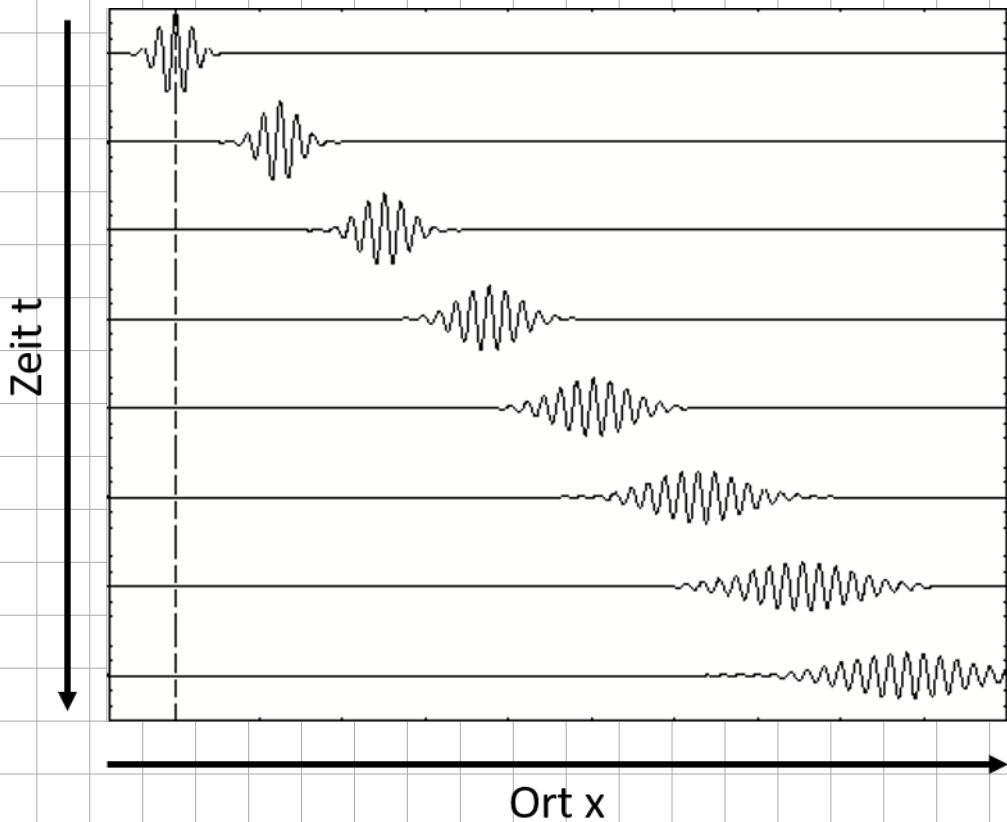
$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} \neq \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} = v_g$$

Außerdem:

$$\Delta p = m \Delta V \text{ const. (lins. ext. Kräfte)}$$

$$\Leftrightarrow \Delta x(t)^2 = \Delta x_0^2 + (\Delta V \cdot t)^2$$

Das Wellenpaket fließt mit der Zeit auszumander!



Zahlenbeispiel : H<sub>0</sub>-Atom in vorgestellten  
Doppelspalt - Exp. :

$$\Delta x_0 = \lambda / \beta = 50 \text{ pm} \quad m_{H_0} \approx 4 \text{ u}$$

$$\Delta x(t_2) = \sqrt{2} \Delta x_0 \quad (\Rightarrow) t_2 \approx 10^{-13} \text{ s}$$

### 1.3.2 Zeitunabhängige Schrödinger - Gl.

Für zeitunabhängige Potentiale

$$V(\vec{r}, t) \rightarrow V(\vec{r})$$

benutzen wir als Ansatz für die Wellenfunktion  
eine Trennung der Variablen:

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \gamma(\vec{r}) \cdot \phi(t) = \gamma(\vec{r}) \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

$\Rightarrow$  Einsetzen in SGL und Multiplikation

mit  $e^{i \frac{E}{\hbar} t} \Rightarrow$  Differential-Gl. für  $\gamma(\vec{r})$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \gamma(\vec{r}) + V(\vec{r}) \cdot \gamma(\vec{r}) = E \cdot \gamma(\vec{r})$$

- $E$  reelle Zahl (Beweis folgt aus Normalisierbarkeit)

Def  $\hat{H} := \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right)$

$$\Rightarrow \hat{H} \gamma(\vec{r}) = E \cdot \gamma(\vec{r})$$

Zeitunabhängige Schrödinger-Gl.

- (Differential)-Operator  $\hat{H}$  wird angewandt auf Funktion  $\gamma(\vec{r})$
- Eigenwert-Gleichung:  $E$  und  $\gamma(\vec{r})$  sind gemeinsam zu bestimmen. Für welche  $E$  es überhaupt Lösungen gibt, hängt von  $V(\vec{r})$  ab  $\Leftrightarrow E$  ist "quantisiert"

- Vergleich mit klass. Hamilton-Funktion

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

legt Interpretation von  $E$  als Energie des (Eigen-) Zustands  $\Psi(\vec{r})$  nahe

- Für einen Eigenzustand gilt

$$\begin{aligned} P(\vec{r}, t) &= |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}) \cdot \left( \frac{E}{\hbar^2} t \right)^{-1} \cdot \Psi(\vec{r}) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \\ &= |\Psi(\vec{r})|^2 = P(\vec{r}) \end{aligned}$$

Wahrscheinlichkeitsdichte ist  
zeitunabhängig