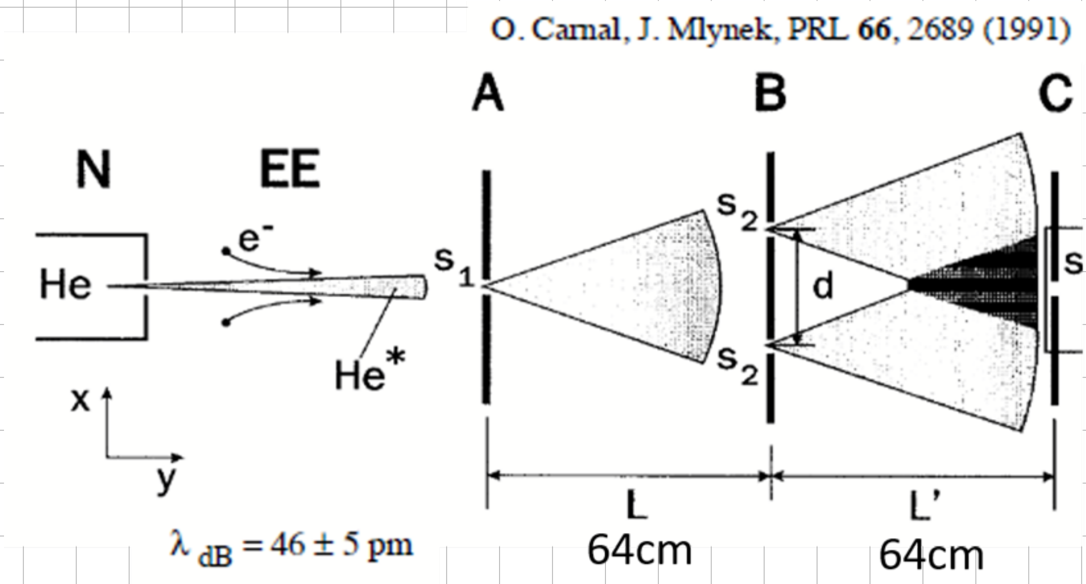
1.3 Materiewellen / QM-Grundlagen

Quantenmechanik ist motiviert / gerechtfertigt durch exp. Beobachtungen.

Ein Beispiel (von vielen):



$s_2 = 1\,\mu m$

$d = 8\,\mu m$

Doppelspalt-Versuch mit einzelnen(*) He-Atomen

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

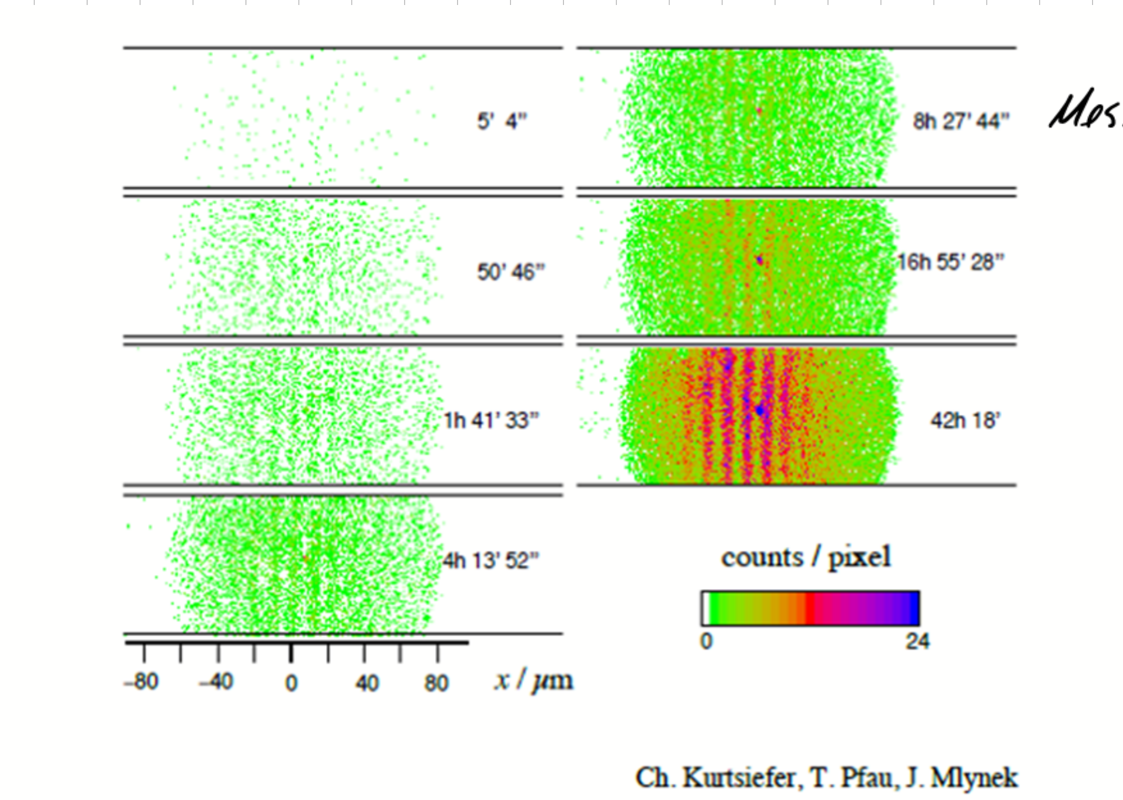
(Nahezu) immer nur ein He-Atom im Interferometer

Startbedingungen für jedes einzelne Atom sehr gut kontrolliert:

Ort: Austritt des Einzelspalt

Geschwindigk.: $v_\perp$ limitiert durch Spaltbreite

Signal auf dem Schirm:



Messzeit

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: Reihenfolge / Orte einzelner Atom-"events" folgt nur der Ensemble-Wahrscheinlichkeit

② und ③ sind mit klass. Physik nicht erklärbar!

$\Rightarrow$ fundamental neuer Ansatz nötig

Hypothesen und Postulate der Quantenmechanik:

1) Materie zeigt Welleneigenschaften

$\Rightarrow$ 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

- $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ "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 (*).

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

$\Rightarrow$ Borns Regel (1926):

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

gibt die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zur Zeit t am Ort(*) $\vec{r}$ zu finden.

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

$P(\vec{r},t) \hat{=}$ Wahrscheinlichkeitsdichte

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

$\Longleftrightarrow$ Für "gute" (= phys. sinnvolle) Wellenfunktionen:

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

$$\Longleftrightarrow \quad \vec{r} \longrightarrow \infty : \quad \begin{matrix} \psi(\vec{r},t) \\ P(\vec{r},t) \end{matrix} \longrightarrow 0$$

Teilchen ist in einem endlichen Volumen zu finden

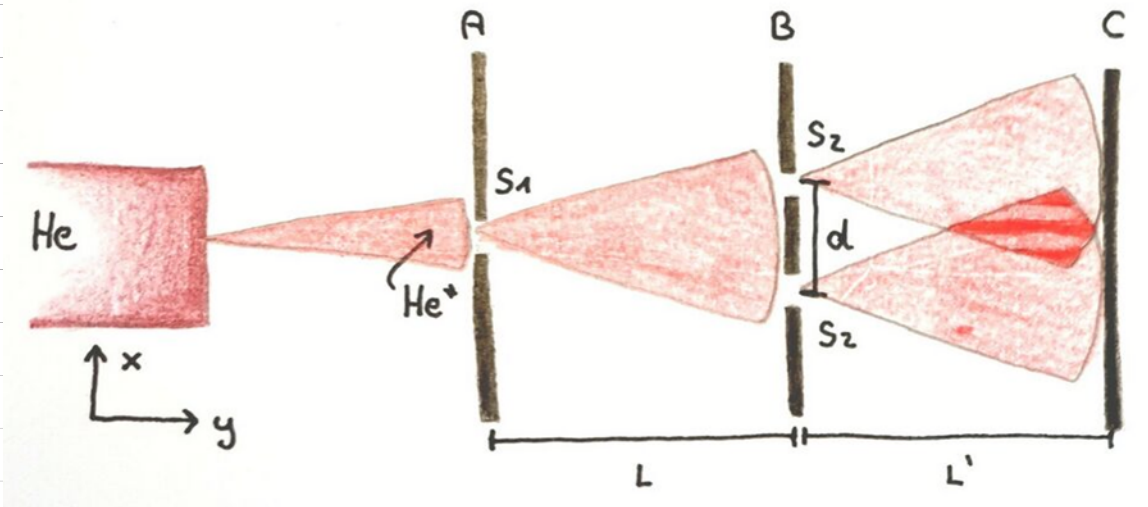
Anwenden dieser Postulate auf das Experiment

1) Der Anfangszustand eines He-Atom am Eingang des Interferometers = Ausgang eines Ofens - wird beschrieben durch ein Wellenpaket

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

mit räumlicher Ausdehnung $(\psi(\vec{r}, t=0) \neq 0)$ gegeben durch die de Broglie-Wellenlänge $\lambda_{dB} = \frac{h}{p} \sim 50\,pm$

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



Insbesondere können wir berechnen:

$$\psi(x, y = B, z)$$

3) Der Doppelspalt führt eine "Messung" durch

$\Rightarrow$ Postulat 3 / Teilchenbild:

- Das Atom prallt mit Wahrscheinlichkeit

$$P_W(x_W, y = B, z, t) = |\psi(x_W, B, z, t)|^2$$

$$x_W \mathrel{\hat{=}} \text{abgedeckter Bereich}$$

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

Die ist homogen und linear

$\Rightarrow$ Superposition $\psi = \alpha \psi_1 + \beta \psi_2$

von Lösungen sind auch Lösungen

Hier (wie bei Licht):

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

Wellenfunktion nach dem Doppelspalt hat 2 Beiträge, jeweils die Anteile des Ausgangspaket, welche ungestört durch einen der 2 Spalte gelaufen ist.

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

$P(x, (\,, z, t)\, dx\, dy$

$= | \psi_L(x, (, z, t) + \psi_R(x, (, z, t) |^2 \, dx\, dz \in [0 \ldots 1]$

Wahrscheinlichkeit des Aufleuchten 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

  DETERMINISTISCH

  $\Leftrightarrow$ 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

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

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

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

  PROBALISTISCHE Aussage

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

Frage: Was ist ein Ereignis / eine Messung?

(vorerst) stark vereinfacht:

Kontakt des QM-Wellenpakets
mit der klassischen / makroskopischen Umgebung,
z.B. einem Detektor

1.3.1 Dispersion und Unschärfe

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

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \qquad |\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- de Broglie: $\lambda = \frac{h}{p} \implies \vec{p} = \hbar \vec{k}$
- inspiriert von Photonen: $E = \hbar \omega$

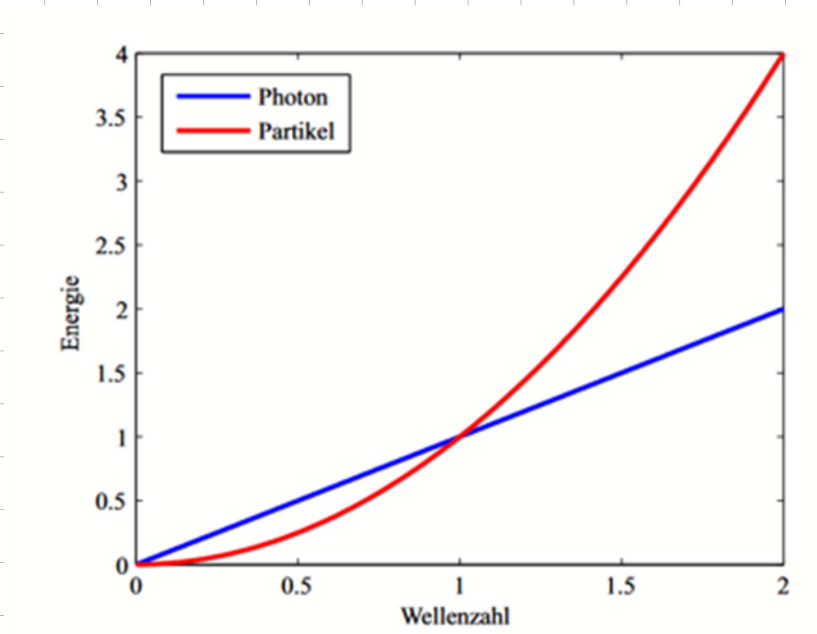
$\implies$

$$\Psi_{MW}(\vec{r}, t) = A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(E \cdot t - \vec{p} \cdot \vec{r})}$$

ebene Materiewelle

einsetzen in SGL gibt

$$E = \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$ Dispersionsrelation (quadratisch)



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

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

$\Leftrightarrow$ keine phys. sinnvolle Wellenfkt.

Linearität der SGL $\Rightarrow$

Wellenpaket als Überlagerung ebener Wellen:

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

erlaubt räumliche Lokalisierung der Wahrscheinlichkeitsdichte

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

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

Gausspaket für Wellenzahlen

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

in (*) liefert:

$$\Psi(x, t=0) = \left(\frac{2}{\pi \sigma^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{\sigma^2}} \, e^{i k_0 x}$$

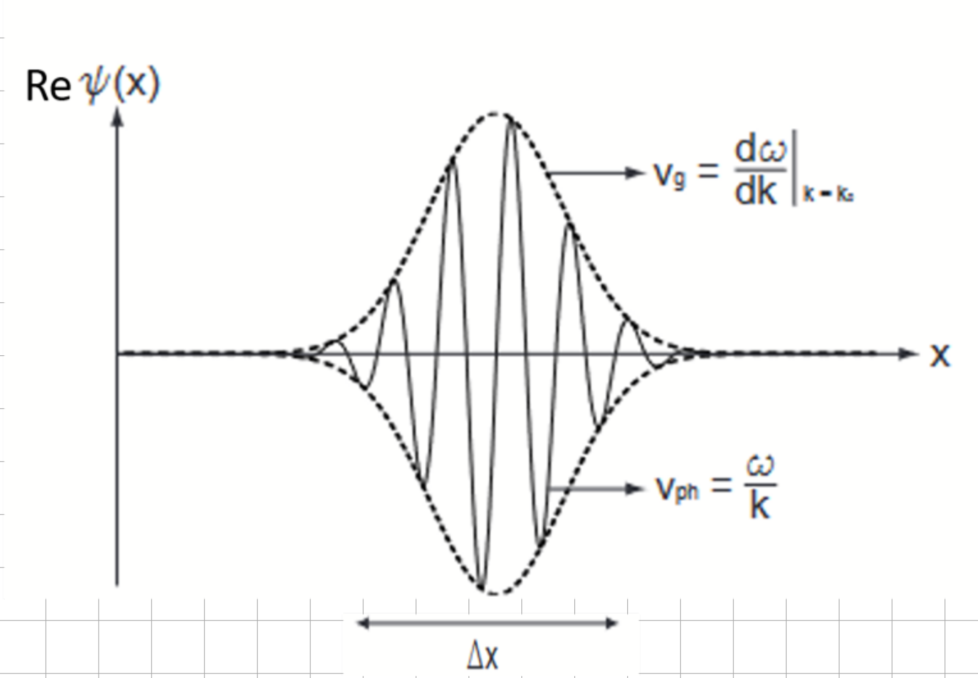
Räumliche Ausdehnung $\Delta x = \sigma$

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

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

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

Bem.: $A(k)$ ist die Fouriertrafo von $\Psi(x,0)$



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

Phasengeschw. Gruppengeschw.

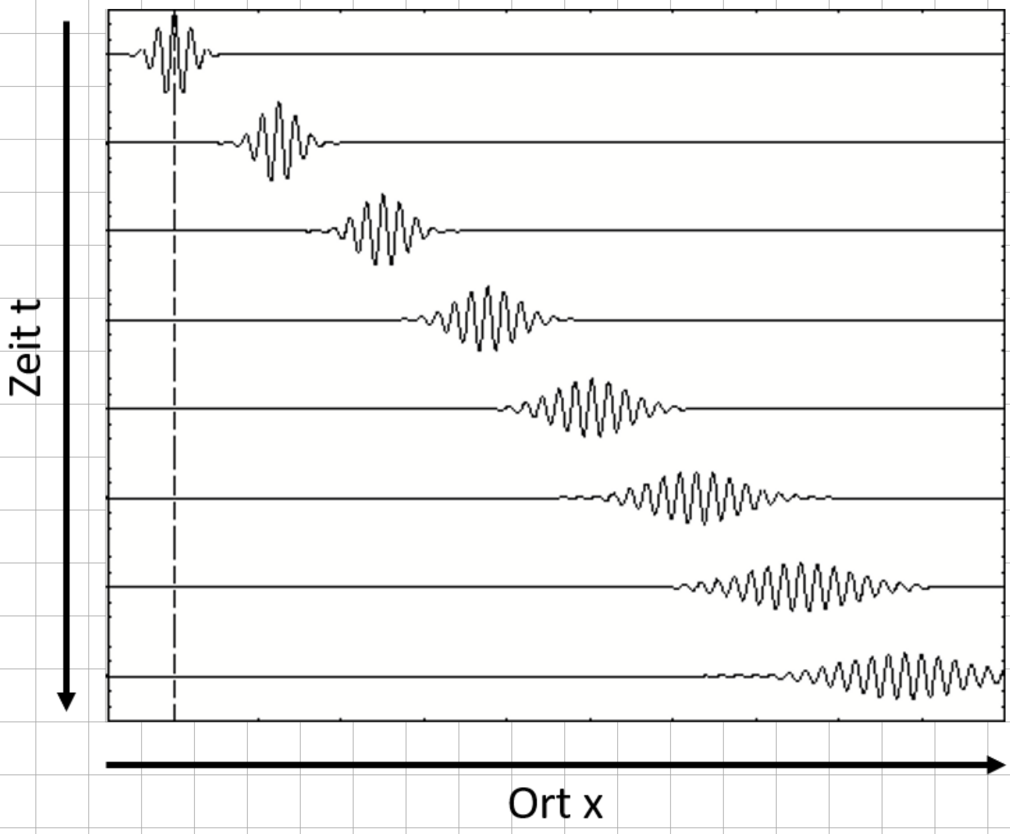
$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} \neq \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k=k_0} = v_g$$

Außerdem:

$\Delta p = m\Delta v$ const. (keine ext. Kräfte)

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

Das Wellenpaket fliesst mit der Zeit auseinander!



Zahlenbeispiel: He-Atom im vorgestellten Doppelspalt-Exp.:

$$\Delta x_0 = \lambda_{dB} = 50\,\text{pm} \qquad m_{He} \approx 4\,u$$

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

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:

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

$\Rightarrow$ Einsetzen in SGL und Multiplikation mit $e^{i\frac{E}{\hbar}\cdot t}$ $\Rightarrow$ Differential-Gl. für $\psi(\vec{r})$

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

- E reelle Zahl (Beweis folgt aus Normierbarkeit)

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

$$\boxed{\Rightarrow \quad \hat{H}\psi(\vec{r}) = E\cdot\psi(\vec{r})}$$

Zeitunabhängige Schrödinger-Gl.

- (Differential)-Operator $\hat{H}$ wird angewandt auf Funktion $\psi(\vec{r})$

- Eigenwert-Gleichung: E und $\psi(\vec{r})$ 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

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

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

- Für einen Eigenzustand gilt

$$P(\vec{r},t) = |\Psi(\vec{r},t)|^2 = \psi^*(\vec{r})\, e^{i\frac{E}{\hbar}t} \cdot \psi(\vec{r})\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

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

Wahrscheinlichkeitsdichte ist zeitunabhängig