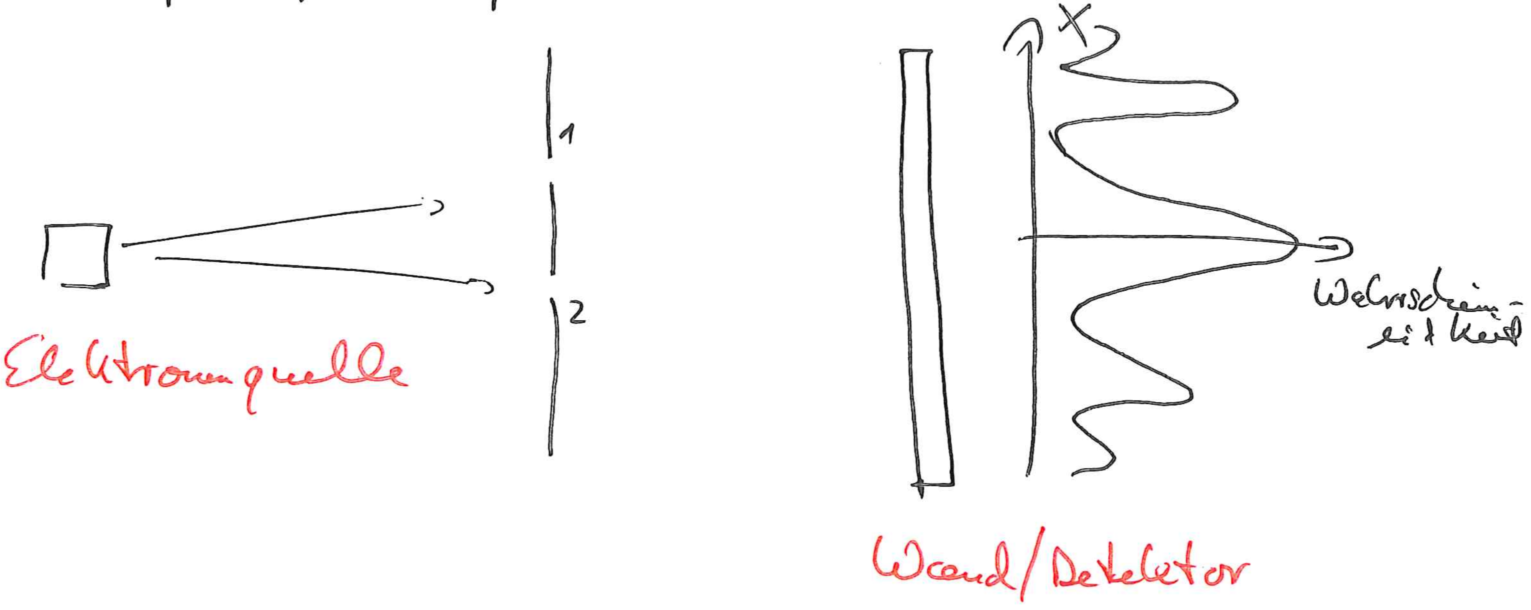
Teil 2

Quantenmechanik

6 Grundlagen der Quantenmechanik

6.1 Materiewellen & Heisenbergsche Unschärferelation

Doppelspaltexperiment



Beim Doppelspaltexperiment ergibt sich ein Interferenzmuster wie bei einem entsprechenden Experiment mit elektrodyn. Wellen.

| Tatsächlich kann umgekehrt auch die Teilchennatur von elektrodyn. Wellen (Photonen) nachgewiesen werden.

Als Konsequenz des Experimentes beschreiben wir Teilchen durch Materiewellen(pakete),

$$\psi(\vec{x},t) \in \mathbb{C} \qquad (6.1)$$

mit Wahrscheinlichkeitsamplituden ψ. Die ψ erfüllen das Superpositionsprinzip (lineare Wellenglg.), das heißt,

$\psi_1(\vec{x},t)$ Zustand 1 (Spalt 1 offen)

$\psi_2(\vec{x},t)$ Zustand 2 (Spalt 2 offen)

dann beschreibt

$$\psi(\vec{x},t) = \psi_1(\vec{x},t) + \psi_2(\vec{x},t) \qquad (6.2)$$

die Situation mit Spalt 1 & 2 offen: Die Wahrscheinlichkeit P ist durch

$$P = |\psi|^2 = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \underbrace{(\psi_1\psi_2^* + \psi_2\psi_1^*)}_{\text{Interferenzterm}} \qquad (6.3)$$

gegeben.

Wie im Fall der Lösung der Maxwellschen Gleichungen, siehe Gl. (4.50), Seite 77, können wir die allgemein Lösung der gedachten Wellengl. als Superposition von ebenen Wellen schreiben. Sei

$$\phi(\vec{x},t) = \varphi(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\vec{x}-i\omega t} \qquad (6.4)$$

eine Lösung der (freien) Wellengleichung. Die entsprechende Wahrscheinlichkeit ist

$$|\phi(\vec{x},t)|^2 = |\varphi(\vec{k})|^2 \qquad (6.5)$$

und die allgemein Lösung ist durch

$$\psi(\vec{x},0) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}}\, \varphi(\vec{k})\, e^{i\vec{k}\vec{x}} \qquad (6.6)$$

bei $\boxed{t=0}$ gegeben. In einer Dimension $(\vec{k}\to k)$ gilt

$$\psi(x,0) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\, \varphi(k)\, e^{ikx}, \qquad (6.7)$$

wieder bei $\boxed{t=0.}$

Für die Interpretation einer Wahrscheinlichkeitsamplitude muß

$$\int_{\mathbb{R}} dx \, |\Psi(x,0)|^2 = 1 \qquad (6.8)$$

gelten. Wir haben

$$\psi(\vec{x},0)\,\psi^*(\vec{x},0)$$

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{dx}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} dk \, dk' \, \varphi(k) \, \varphi^*(k') \, e^{i(k-k')x} \qquad (6.9)$$

$$= \int_{\mathbb{R}^2} dk \, dk' \, \varphi(k) \varphi^*(k') \underbrace{\int_{\mathbb{R}} \frac{dx}{2\pi} e^{i(k-k')x}}_{\delta(k-k')} = \int_{\mathbb{R}} dk \, |\varphi(k)|^2 = 1,$$

mit Wahrscheinlichkeitsamplitude $\varphi(k)$ auf dem Raum der Wellenvektoren (Impulse) k.

Eine Materiewelle muß lokalisiert sein, sowohl im Orts- als auch im Impulsraum. Sei nun

$$\phi(k) = A \, e^{-\alpha(k-k_0)^2} \qquad (6.10)$$

ein Gaußsches Wellenpaket (im Impulsraum). Die Normierung auf 1 in (6.9) bedeutet

$$AA^* \int_{\mathbb{R}} dk \, e^{-2\alpha(k-k_0)^2} = 1 = AA^* \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}} \qquad (6.11)$$

$$\Rightarrow AA^* = \sqrt{2\alpha/\pi}$$

Gaußsche Wellenpakete sind sowohl im Ortsraum als auch im Impulsraum Gaußsch:

$$\psi(x,0) = \int_{\mathbb{R}} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} A\, e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx}$$

$k' = k - k_0$ $\downarrow$

$$= \left[\int_{\mathbb{R}} \frac{dk'}{\sqrt{2\pi}} A\, e^{-\alpha\left[k'^2 - 2\left(\frac{ix}{2\alpha}\right)k'\right]}\right] e^{ik_0x}$$

$\tilde{k} = k' - \frac{ix}{2\alpha}$ $\downarrow$

$$= \underbrace{\left[\int \frac{d\tilde{k}}{\sqrt{2\pi}} A\, e^{-\alpha\,\tilde{k}^2}\right]} e^{-\frac{1}{4\alpha}x^2 + ik_0x}$$

$$= A \cdot 1/\sqrt{2\alpha}\; e^{-\frac{1}{4\alpha}x^2} e^{ik_0x}$$

$\xrightarrow[\text{\& Gl. (6.11)}]{A \text{ reell}}$
$$\boxed{\psi(x,0) = \left(\frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/4}}\, e^{ik_0x}\right) e^{-\frac{1}{4\alpha}x^2}} \qquad (6.12)$$

Die Normierung auf 1 ist leicht überprüft,

$$\int dx\, |\psi(x,0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} \int_{\mathbb{R}} dx\, e^{-\frac{1}{2\alpha}x^2} = 1 \qquad (6.13)$$

In 3 räumlichen Dimensionen gilt

$$\boxed{\phi(\vec{k}) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4} e^{-\alpha(\vec{k}-\vec{k}_0)^2}, \quad \psi(\vec{x},0) = \frac{1}{(2\pi\alpha)^{3/4}}\, e^{i\vec{k}_0\vec{x}}\, e^{-\frac{1}{4\alpha}\vec{x}^2}} \qquad (6.14)$$

Die Gleichungen (6.12)/(6.14) sind leicht auf ein Wellenpaket am Ort x_0 zu verallgemeinern (Übung).

Die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi(x,0)$ in Gl. (6.12) beschreibt eine Gaußsche Verteilung, $\sigma_x = \sqrt{\alpha}$

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_x} e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}x^2} \qquad (6.13)$$

mit Breite $\Delta x = \sigma_x$:

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} \qquad (6.14)$$

Δx ist die Varianz (Schwankungsquadrat / 2tes Moment) der Wahrscheinlichkeitsverteilung $w(x)$, $\langle f(x) \rangle$ bezeichnet

$$\langle f(x) \rangle = \int dx \, P(x) \, f(x) \qquad (6.15)$$

In unserem Fall gilt

$$\underbrace{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}_{>0} = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle \langle x \rangle + \langle x \rangle^2$$

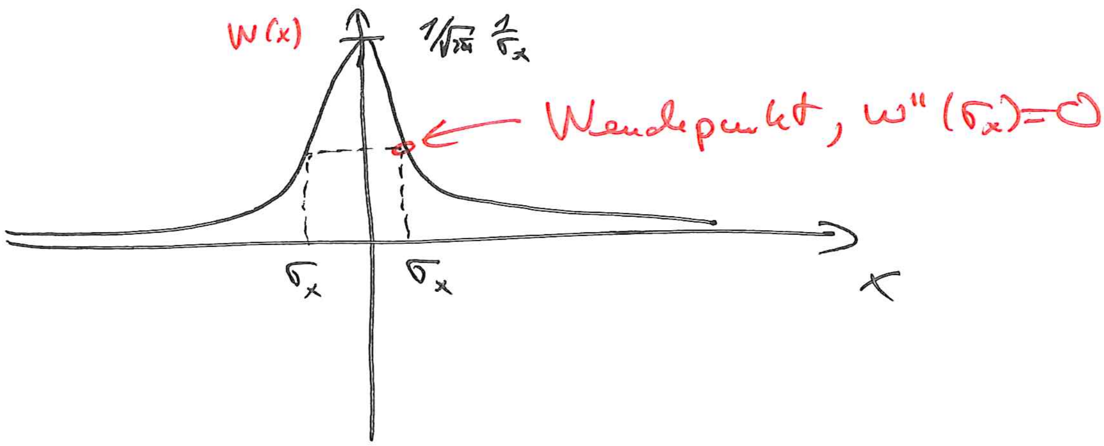
$$= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \qquad (6.16)$$

mit $\boxed{\langle x \rangle = 0}$, wg $w(x) = w(-x)$.

Es gilt

$$\Delta x^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_x} \int dx\; x^2\, e^{-\frac{1}{2\sigma_x^2}x^2}$$

$$= \sigma_x^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx\; e^{-\frac{1}{2}x^2} = \sigma_x^2 \qquad (6.17)$$



Analog können wir die Breite der Verteilung im Impulsraum ausrechnen, $\Delta k = \sqrt{\langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle}$, siehe 121

$$\sigma_k = 1/2\sigma_x \implies \boxed{\Delta k \cdot \Delta x = 1/2} \qquad (6.18)$$

für eine Gaußsche Verteilung.

Mit der Einsteinschen Relation zwischen Impuls p und Wellenvektor k; für Materie de Broglie

$$p = \hbar k \qquad (6.19)$$

ergibt sich

$$\boxed{\Delta p \cdot \Delta x = \hbar/2} \qquad (6.20)$$

$$\Delta k = \sqrt{\langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle} :$$

(1) $\langle k \rangle = k_0$

(2) $\langle k^2 \rangle = \int dk \; k^2 \; \tilde{w}(k)$

$\tilde{w}(k) = |\varphi(k)|^2$

$$= \frac{1}{4 \sigma_x}$$

Die Gaußsche Verteilung ist die Grenzverteilung jeder stat. Verteilung für große Zahlen (~ klass. Limes der QM). Im Allgemeinen ist die Unschärfe

$$\boxed{\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar/2} \qquad (6.21)$$

mit $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}\,\mathrm{Js} = 6.58 \cdot 10^{-16}\,\mathrm{eVs}$.

Die bisherigen Überlegungen gelten für belieb. lineare Wellengleichungen. In der E-dyn hatten wir die Wellengl. mit der Dispersionsrel.

$$\omega^2 = c^2 k^2 \qquad (6.22)$$

fixiert. Da unser Wellenpaket ein Teilchen mit klassisch fixiertem Impuls (oder Wellenvektor k_0) beschreiben soll, setzen wir (de Broglie)

$$\omega(k) = \underbrace{\omega(k_0)}_{\omega_0} + (k-k_0)\underbrace{\frac{\partial\omega}{\partial k}(k_0)}_{v_g} + \frac{1}{2}(k-k_0)^2 \underbrace{\frac{\partial^2\omega}{\partial k^2}(k_0)}_{\gamma} + O((k-k_0)^3) \qquad (6.23)$$

oder

$$\omega(k) := \omega_0 + v_g\,(k-k_0) + \gamma\,(k-k_0)^2 \qquad (6.24)$$

mit Gruppengeschwindigkeit v_g. Damit gilt

$$\psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int dk\, e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx} \cdot e^{-i\omega_0 t - i(k-k_0)v_g t - i\gamma(k-k_0)^2 t}$$

$k' = k - k_0$

$$= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 x - i\omega_0 t} \int dk'\, e^{-(\alpha - i\gamma t)k'^2} e^{ik'(x - v_g t)}$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{2(\alpha + i\gamma t)}}\, e^{ik_0 - i\omega_0 t}\, e^{-(x - v_g t)^2/(4(\alpha + i\gamma t))} \qquad (6.25)}$$

Das Wellenpaket verschiebt sich mit der Geschwindigkeit v_g und zerfließt mit der Zeit: Die Breite σ_x ist nun zeitabhängig und es gilt

$$\boxed{\sigma_x(t) = \sqrt{\frac{\alpha^2 + \gamma^2 t^2}{\alpha}}} \qquad (6.26)$$

Dies folgt aus der Wahrscheinlichkeitsverl.

$$P(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \frac{|A|^2}{2(\alpha^2+(\gamma t)^2)^{1/2}}\, e^{-(x-v_g t)^2 \frac{\alpha}{2(\alpha^2+\gamma^2 t^2)}} \tag{6.27}$$

mit

$$(x-v_g t)^2 \left(\frac{1}{4(\alpha+i\gamma t)} + \frac{1}{4(\alpha-i\gamma t)}\right) = (x-v_g t)^2 \frac{\alpha}{2(\alpha^2+\gamma^2 t^2)}$$

Wir sehen sofort, daß die Unschärfe mit der Zeit wächst, da $\Delta p(t) = \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{\alpha}}$ konstant bleibt, aber $\Delta x = \sigma_x$ wächst, und damit

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2} \tag{6.28}$$

Wir fassen die Bez. zusammen: (freies Teilchen)

Teilchen	Welle
$E = p^2/2m$	$E = \hbar\omega$
$p = m \cdot v$	$p = \hbar k$

$$\xrightarrow[E=p^2/2m]{\text{Disp.}} \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

(6.29)

$v = p/m = \frac{\partial E}{\partial p}$ deBroglie $\quad v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m}$