1.5. Illustration der Bornschen Interpretation

Bornsche Interpretation mit Blick auf Experimente:

i) Schaffung einer Anfangsbedingung t_0

ii) Ausbreitung t

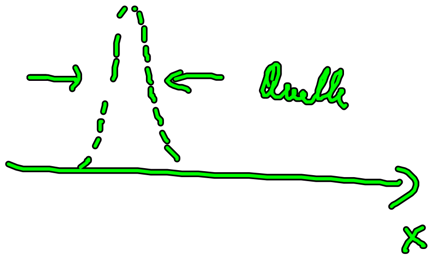
iii) Messung $t_{Meß}$

a) Wellenpaket aus letzter VL

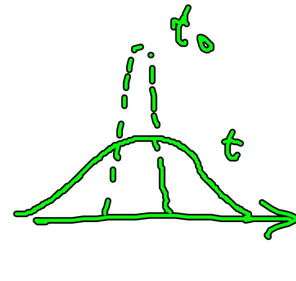
(i) kann eigentlich erst später beschrieben (Elektronenemission)

(ii) Berechng. nach Schrödingergl.

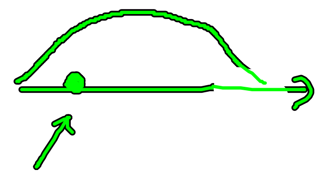
(iii) Registrierung Photoplatte



Strahl einer Quelle lokalisiert



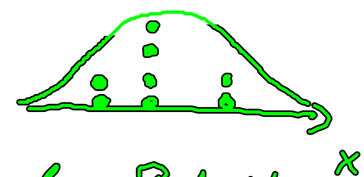
$t < t_{mess}$



1 Punkt pro Elektron auf Platte

$t = t_{mess}$, groß

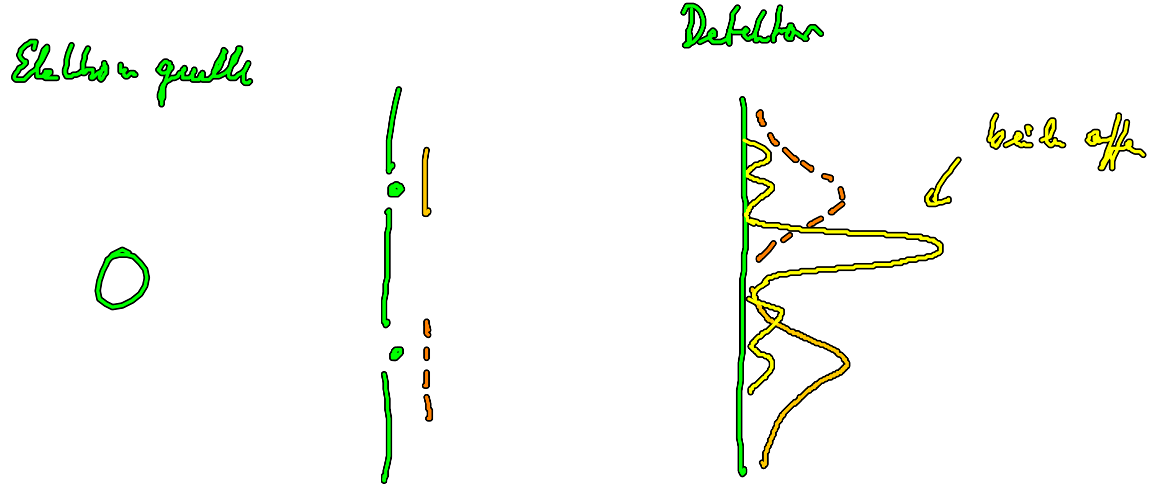
Histogramm



für lange Belichtungszeit bildet sich die $|\psi(\vec{r},t)|^2$ nach

offensichtlich erfolgt Ausbreitung nach Schrödingergleichung (Welle) aber die Detektion ist punktförmig (Teilchen) nach Wahrscheinlichkeitsgesetzen

b) Interferenz am Doppelspalt



wieder findet die Ausbildg. der Verteilg. nur bei mehrmaliger Wiederholung d. Versuchs statt

- offensichtlich sind nur Wahrscheinlichkeitsaussagen mögl. grundsätzlich anders als in klassischer Mechanik
- vielfaches Experiment nötig
- obiges Experiment: Teilchen werden mit geringer Dichte ausgesandt und beeinflussen sich nicht

$\Longrightarrow$ $\Psi(\vec{r},t)$ kann dem einzelnen Elektron zugeordnet werden, Sprechweise: Elektron befindet sich im Zustand $\Psi(\vec{r},t)$.

Kopenhagener Interpretation (Heisenberg, Bohr 1927)

1) Die Wellenfunktion gibt vollständigst mögliche Information des Quantenzustands wieder.

2) Die Übertragung eines einzelnen Quants auf die Messapparatur (makroskopisch) ist unkontrollierbar (und nicht analysierbar.) → es ∃ Verteilungen

3) Prinzipiell nur Wahrscheinlichkeitsaussagen mgl.

2. Erste Aspekte des Operatorformalismus

2.1. Impulsoperator in Ortsdarstellung

bisher: $\langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \left| \hat{\psi}(\vec{p}, t) \right|^2 \vec{p}$

allg. Definition f. Impulsmittelwert in Zukunft alles mit $\psi(\vec{r}, t)$ benutzen.

(bisher 3: 3d.-Raum)

$$\langle \vec{p} \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \underline{\hat{\psi}^*(\vec{p}, t)}\, \vec{p}\, \hat{\psi}(\vec{p}, t)$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \underline{\int d^3r' \, e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}'/\hbar} \, \psi^*(\vec{r}',t)} \; \vec{p} \; \underbrace{\int d^3r \, e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \, \psi(\vec{r},t)}_{*}$$

$$* = \int d^3r \left(-\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \, e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \right) \psi(\vec{r},t)$$

jetzt partiell integrieren

$$= \int d^3r \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \, \psi(\vec{r},t) \right) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

$$- \frac{\hbar}{i} \, e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \, \psi(\vec{r},t) \Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

nach Born normierbar

ganzer Raum

d.h. $\psi(\vec{r} \to \pm\infty, t) = 0$

$$\langle \vec{p} \rangle = \int d^3r \int d^3r' \, \underline{\psi^*(r',t) \, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \psi(\vec{r},t)} \cdot \underbrace{\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} e^{i(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\vec{p}/\hbar}}_{\delta(\vec{r}-\vec{r}')}$$

$$\boxed{\langle \vec{p} \rangle = \int d^3r \, \psi^*(\vec{r},t) \, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \, \psi(\vec{r},t)}$$

gibt den Mittelwert (Erwartungswert) des Impulses an

$\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r$ kann als Impulsoperator interpretiert werden

und die Formel berechnet den Mittelwert dieser Größe

Vorgriff auf generelles Prinzip:

QM ordnet meßbaren Größen Operatoren zu und

gibt ein Formalismus z. Berechnung der Mittelwerte etc.

2.2. Einige Operatoren

a) Impuls

$$\vec{p} \longrightarrow \underline{\vec{P}} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r \qquad \text{Impulsoperator}$$

b) Ort

$$\vec{r} \longrightarrow \underline{\vec{r}} = \vec{r} \qquad \text{Ortsoperator}$$

c) kinetische Energie

$$E_{kin} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \longrightarrow \frac{\underline{\vec{P}}^2}{2m} = \frac{\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r \cdot \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r}{2m} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} \qquad \text{kinet. E-Operator}$$

d) Hamiltonfunktion (konservativ)

$$H = E_{kin} + V \longrightarrow -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\underline{\vec{r}}) \equiv \underline{H} \quad \text{Hamiltonoperator}$$

e) naheliegende Verallgemeinerung der Schrödingergleichung:

$$i\hbar\,\partial_t \Psi = \underbrace{\frac{\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r\right)^2}{2m}}_{\text{kin. En. Operator}} \Psi$$

$$\boxed{i\hbar\,\partial_t \Psi(\vec{r},t) = \underline{H}\,\Psi(\vec{r},t)}$$

allgemeinste Form der Schrödinger-gleichung.

$$\underline{H} = H\left(\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r, \vec{r}\right)$$

klassische H-Funktion

f) Gesamtenergie

$E = H$, legt Energieoperator „$i\hbar\,\partial_t$" nahe.

$$\downarrow$$

$$\underline{E}\,\Psi = \underline{H}\,\Psi$$

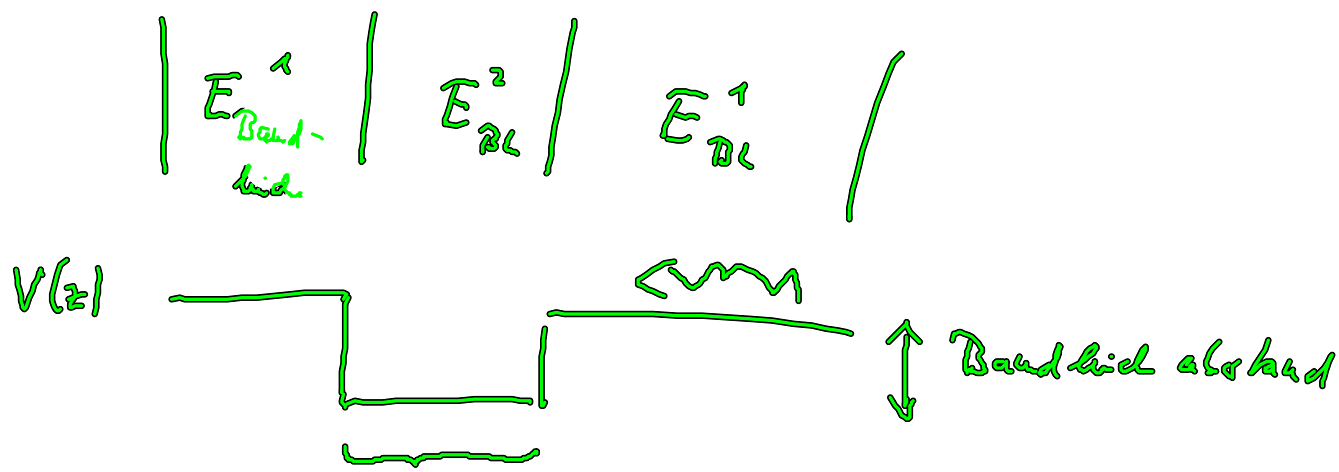
2.3. Beispiele f. Hamiltonoperatoren

a) Teilchen im Potential

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r}) \longrightarrow i\hbar\, \partial_t \psi(\vec{r},t) = \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(\vec{r})\right)}_{H} \psi(\vec{r},t)$$

Wellenpaket unter Einfluß von $V(\vec{r})$

z.B. Halbleiterlaser



50 Å ~ de Broglie → Quantengraben

Design von Eigenschaften d. emittierten Lichts

b) Vielteilchen-Hamiltonoperator

· z.B. Atome, Moleküle enthalten viele Teilchen (N)

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{p}_i^{\,2}}{2m_i} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N)$$

$$\hookrightarrow \quad \underline{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_i\right)^2}{2m} + \frac{1}{2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\sum_{i\neq j}^{N,N} \frac{q_i \cdot q_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

$$\psi : \quad \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots \vec{r}_N)$$

c) Teilchen in elektromagn. Feldern

Elektrodynamik : $\vec{E} = -\partial_t \vec{A} - \vec{\nabla}_r \phi$

$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$

$\vec{A} = \vec{A}(\vec{r}, t)$

$\phi = \phi(\vec{r}, t)$

$\vec{p} \to \vec{p} - q\vec{A}$, potentielle Energie : $q\phi$

$$H = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - q\vec{A}\right)^2 + q\phi$$

$$\underline{H} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_r - q\vec{A}\right)^2 + q\phi$$

zunächst klassische Größe

(ebene Welle etc.)

Quantenelektrodynamik quantisiert auch das elektromagnetische Feld
QED

2.4. Kontinuitätsgleichung für die Wahrscheinlichkeitsdichte

Welche Bewegungsgleichung erfüllt die Wahrscheinlichkeitsdichte ?

$$\rho(\vec r,t) = |\psi(\vec r,t)|^2 = \psi^*(\vec r,t)\cdot\psi(\vec r,t)$$

$$\partial_t\,\rho(\vec r,t) = \underbrace{(\partial_t\psi^*)\,\psi + \psi^*\,\partial_t\psi}_{*} \qquad \dot\psi = \partial_t\psi$$

Schrödingergleichung anwenden (Potential V)

$$\dot\psi = -\frac{\hbar}{i2m}\Delta\psi + \frac{V}{i\hbar}\psi \qquad \Big|\ \psi^*\cdot$$

$$\dot\psi^* = \frac{\hbar}{i2m}\Delta\psi^* - \frac{V}{i\hbar}\psi^* \qquad \Big|\ \cdot\psi$$

$*$ dann addieren

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec r,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\left(\vec\nabla_r^2\psi^*\right)\psi - \psi^*\left(\vec\nabla_r^2\psi\right)\right)$$

$$\text{üA} \nearrow \; = -\vec{\nabla}_r \cdot \underbrace{\left\{ \frac{\hbar}{2mi} \psi^* \left(\vec{\nabla}_r \psi\right) - \left(\vec{\nabla}_r \psi^*\right) \psi \right\}}_{\equiv \vec{j}}$$

als Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r},t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r},t) = 0}$$

Kontinuitätsgleichung der Wahrscheinlichkeit

<u>Bemerkung:</u> a) es läßt sich keine geschlossene Gleichg. f. $\rho = |\psi|^2$ ableiten, denn $\vec{j}$ enthält ψ und nicht nur ρ.

b) $\vec{j}$ wird als Wahrscheinlichkeitsstromdichte interpretiert

$$\vec{j} = \frac{1}{2} \left(\psi^* \underbrace{\frac{\vec{p}}{m}}_{\sim \text{Geschwindigkeit}} \psi - \psi \frac{\vec{p}}{m} \psi^* \right)$$

c/ Integration über Volumen

+ Satz v. Gauß :

$$\dot{W} = -\oint\!\!\oint_{\partial V_0} d\vec{A}\cdot\vec{j}$$

$$W = \iiint_{V_0} dV \; \rho(\vec{r},t)$$

W Wahrscheinlichkeit Teilchen in V zu finden