2.3 Welle-Teilchen-Dualismus

· **Folgerungen:** „Kopenhagener Deutung" der QT

1. Welle-Teilchen-Dualismus (Bohrsche Komplementarität):
   a) Beide Eigenschaften sind zur Erklärungen von Experimenten notwendig
   b) Bei Messung tritt nur eine Eigenschaft in Erscheinung
   $\longrightarrow$ kein Widerspruch
2. Klassische Bahnen von Teilchen existieren nicht mehr.
   Zwischen 2 Messungen kann keine Bahn festgelegt werden.
3. Statistische Deutung der Materiewelle $\psi(\underline{r},t)$ (Born, 1926):

$$|\psi(\underline{r},t)|^2 d^3r \ \ldots \ \text{Wahrscheinlichkeit, Teilchen bei } \underline{r} \text{ im Volumen } d^3r \text{ zu finden} \qquad (2.23)$$

$|\psi(\underline{r},t)|^2$ ... Wahrscheinlichkeitsdichte

Normierung: $\displaystyle\int_{\text{gesamtes Volumen}} d^3r\, |\psi(\underline{r},t)|^2 = 1$ (2.24

· Welle-Teilchen-Dualismus: auch für Photonen (s. Kap. 2.1)

Achtung: em Feld ist <u>nicht</u> Wahrscheinlichkeitswelle

Photon folgt aus „Quantisierung" des em Feldes $\hat{=}$ QED
(Quanten-Elektrodynamik)
$\longrightarrow$ s. QM II

2.4. Kurze Einführung in die Wahrscheinlichkeitsrechnung

· **Def:**

$$\boxed{\left.\begin{array}{l}\text{stochastische}\\ \text{Zufalls-}\end{array}\right\}\text{variable} \;\hat{=}\; \begin{array}{l}\text{Wertebereich}\\ \text{\& Wahrscheinlichkeits-}\\ \text{verteilung } P(x)\end{array}} \qquad (2.25)$$

• diskrete Verteilung: $x = x_1, x_2, \dots, x_N$

$P(x_i)$ ... Wahrscheinlichkeit für x_i

$$\sum_{i=1}^{N} P(x_i) = 1$$

Bsp: Würfel: x ... Wurfzahl

$x_1 = 1,\ x_2 = 2,\ x_3 = 3,\ x_4 = 4,\ x_5 = 5,\ x_6 = 6$

$$P(x_i) = \frac{1}{6}\ ,\quad i = 1, \dots, 6 \longrightarrow \sum_{i=1}^{6} P(x_i) = 1$$

• kontinuierliche Verteilung:

$$\boxed{\begin{array}{l} x \in [x_1, x_2] \\ P(x)\,dx \text{ ... Wahrscheinlichkeit für } [x, x+dx] \\ \int_{x_1}^{x_2} P(x)\,dx = 1 \\ P(x) \text{ ... Wahrscheinlichkeitsdichte} \end{array}} \qquad (2.26)$$

• Mittel-/Erwartungswert einer Observablen $f(x)$:

$$\boxed{\langle f \rangle = \int f(x)\ \underbrace{P(x)\,dx}_{\text{Wahrscheinlichkeit mit der } x,\ f(x) \text{ vorkommt}}} \qquad (2.28)$$

Bsp: Würfel:
mittlere Wurfzahl: $\langle x \rangle = \sum_{i=1}^{6} x_i\ P(x_i)$

$$= \frac{1}{6}(1+2+3+4+5+6) = \frac{21}{6} = 3{,}5$$

• $$\boxed{\begin{array}{l} n.\text{tes Moment von } P(x): \\ \langle x^n \rangle = \int x^n P(x)\,dx \end{array}}$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{Mittelwert: } \langle x \rangle \\ \text{Varianz} = \text{mittlere quadratische Abweichung von } \langle x \rangle \\ \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \overset{\langle x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 \rangle}{=\!=} \langle x^2 - \langle x \rangle^2 \rangle = \mathrm{Var}(x) \end{array}} \qquad (2.29)$$

$$= \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle^2 + \langle x \rangle^2$$

$$\boxed{\text{Standardabweichung: } \sqrt{\mathrm{Var}(x)} \quad \ldots \quad \text{„Breite" von } P(x)} \qquad (2.30)$$

Bsp: Gaußsche Verteilung: s. Übungen

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma^2}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x)\,dx = 1!$$

$$\langle (x-x_0)^n \rangle = \begin{cases} 0, & n \text{ ungerade} \\ (n-1)!!\,\sigma^n, & n \text{ gerade} \end{cases}$$

- $\boxed{\text{Kenntnis aller } \langle x^n \rangle \longleftrightarrow P(x)}$

Beweis: s. Übungen

$\longrightarrow$ charakt. Funktion

3 Die Schrödinger-Gleichung

- Ges: Wellengleichung für Materie-/Wahrscheinlichkeitswelle

3.1 Die freie Schrödinger-Gleichung (SG)

freies Teilchen, ohne Potential $\}$ nicht-relativistisch!

• Forderungen an SG:

1. ebene Welle mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ als Lsg.
2. Dgl. 1. Ordnung in der Zeit $\longrightarrow$ $\psi(\underline{r},t)$ durch Anfangsverteilung $\psi(\underline{r},t=0)$ bestimmt
3. lineare & homogene Dgl.
   $\longrightarrow$ Superpositionsprinzip gilt für verschiedene ebene Wellen
   ($\rightarrow$ Wellenpacket, s. Kap. 3.2)
4. homogene Dgl. $\longrightarrow$ $|\psi|^2$ ... Erhaltungsgröße
   $\hat{=} \int_V d^3r \, |\psi(\underline{r},t)|^2 = 1$ (vgl. Kap. 3.4)

$$\Longrightarrow \boxed{\begin{array}{l} i\hbar \dfrac{\partial \psi}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2 \psi \\[2ex] \text{mit } \underline{\nabla}^2 = \Delta = \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial z^2} \end{array}} \quad (3.1)$$

... Laplace-Operator

kartes. Koord.

• Lsg.? ebene Welle:

$$\psi(\underline{r},t) = A\, e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)} \quad (3.2)$$

$$\xrightarrow[(3.1)]{\text{in}} \hbar\omega \cancel{\psi} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\cancel{\psi} \longrightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{qed}$$

• Bem: $\cos(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)$, $\sin(\ldots)$ keine Lsg. von (3.1)! $\rightarrow$ nur komplexe Welle

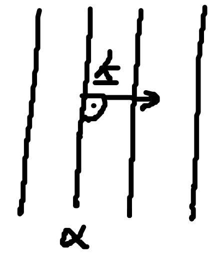
3.2 Wellenpakete

• Ziel: freies Teilchen = Wellenpaket!

„Teilchen"

a) <u>ebene Welle</u>

- Raum-Zeit-Pkte. gleicher Phase
  in (3.2): $\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t=\alpha \;\hat{=}\;$ Ebene



- Phasengeschw. v_{ph}:
  bilde $\frac{d}{dt}(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t=\alpha) \longrightarrow \underline{k}\cdot\underbrace{\frac{d\underline{r}}{dt}}_{\underline{v}_{ph}}=\omega$, $\underline{v}_{ph}\parallel\underline{k}$

$$\longrightarrow \underline{v}_{ph}=\frac{\omega}{k}\,\hat{\underline{k}}\,,\quad \hat{\underline{k}}=\frac{\underline{k}}{k}$$

mit $\omega=\frac{\hbar k^2}{2m} \longrightarrow \boxed{\begin{aligned}\underline{v}_{ph}&=\frac{\hbar k}{2m}\,\hat{\underline{k}}=\frac{\underline{p}}{2m}\\&=\frac{\underline{v}}{2}\end{aligned}}$ (3.3)

de Broglie: $\underline{p}=\hbar\underline{k}$

- $\psi=A\,e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r}-\omega t)} \longrightarrow$ (i) $|\psi(\underline{r},t)|^2=|A|^2=$ konst.

  ... Teilchen überall mit gleicher Wahrscheinlichkeit

  (ii) $\iiint_{\cancel{-\infty}}^{\cancel{\infty}} d^3r\,|\psi(\underline{r},t)|^2 \longrightarrow \infty$ ... <u>nicht</u> normierbar

  i.f. weglassen

  ebene Welle ≙ idealisierter Teilchenzustand

Abhilfe zu (ii): (1) normierte Wellenpakete
(2) endliches Volumen $V \longrightarrow A=\frac{1}{\sqrt{V}}$

b) Fourier-Transformation (1dim): „Entwicklung nach ebenen Wellen"

· Satz: Geg: stückweise, stetiges $f(x)$ mit $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |f(x)| < \infty$ (*)

$\longrightarrow$ Fourier-Transformierte: $\bar{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} f(x) e^{-ikx}$

$\xrightarrow{\text{o.B.}}$ Fourier-Entwicklung:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \bar{f}(k)\, e^{ikx}$$

· Bem (i) „absolute Integrierbarkeit" (*) hinreichend, nicht notwendig

(ii) Konvention: $\int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \ldots, \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \ldots \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} \ldots$

„normierte" Eigen fkt. [s. später]

sonst: $\int dx \ldots, \int \frac{dk}{2\pi} \ldots$

(iii) $f(x) \in \mathbb{R} \longrightarrow \bar{f}(-k) = \underbrace{\bar{f}^*(k)}_{\text{konjugiert-komplex zu } \bar{f}(k)}$

[Beweis: $f^*(x) = f(x)$]