

Theoretische Physik II (Quantenmechanik I), Bachelor-Physik, SS 11

1. Schrödinger'sche Wellenmechanik

1.1 Einführung

Die Quantenmechanik (QM) stützt sich auf ein widerspruchsfreies abstraktes Denkgebäude, das aus der Sicht der klassischen Physik wenig intuitiv ist. Aus diesem Grunde gilt die QM als konzeptionell schwierig; eine quantenmechanische Intuition" wird sich erst im Zuge der intensiven Auseinandersetzung entwickeln.

QM muss aber sein, da eindeutige experimentelle Befunde (nicht nur aus dem atomaren Bereich) klassisch nicht erklärt werden können:

- Stabilität der Atome, scharfe Spektrallinien des von Atomen absorbierten oder emittierten Licht (→ Liniencharakter der atomaren/molekularen Absorptions- und Emissionsspekten)
- Photo- und Compton-Effekt
- Beugung von Kathodenstrahlen
- Supraleitung, Superfluidität
- spektrale Energieverteilung der Wärmestrahlung
- Wärmekapazität fester Körper bei niedrigen Temperaturen
- ... (weitere Beispiele vgl. Kap. 1.2)

1.1 Experimentelle Grundlagen. Lichtteilchen und Materiewellen. Welle-Teilchen-Dualismus

A: Licht als Welle

Welle aus der Experimentalphysik/Elektrodynamik vertraut nicht lokalisiertes Objekt mit Wellenvektor \underline{k} und Frequenz ω .

- ebene Welle in x-Richtung: $u(x, t) = u_0 e^{i(kx - \omega t)}$

Wellen zeigen Interferenz, Beugung usw.

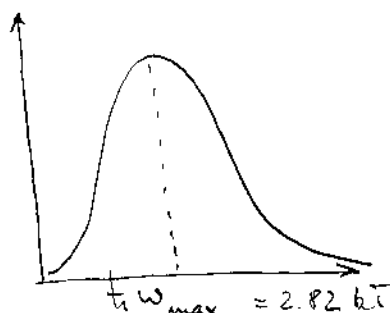
B: Licht als Teilchenstrom

Teilchen: lokalisiertes Objekt mit Energie E und Impuls p ; u.U. mit Ruhemasse m_0 , Ladung q , Spin s , usw.

- Hohlraumstrahlung (Max Planck, 1900):

Hypothese, die Energie einer elektromagnetischen Welle sei in Einheiten $\Delta E = \hbar \omega$ portioniert \rightarrow gequantelt erklärt die Frequenzverteilung der Hohlraumstrahlung

$$u(\omega; T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1}$$



Die Planck'sche Strahlungsformel enthält die bereits vorher experimentell bestätigten Grenzfälle für kleine ω ($u \sim \omega^2 \rightarrow$ Rayleigh/Jeans), für große ω , das Wien'sche Verschiebungsgesetz und das Stefan-Boltzmann'sche Gesetz (Gesamtenergie $\sim T^4$). Die universelle Konstante ergibt sich durch Vergleich mit dem Experiment

$$\hbar := \frac{h}{2\pi} \cong 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ Nms} \rightarrow \text{Planck'sches Wirkungsquantum}$$

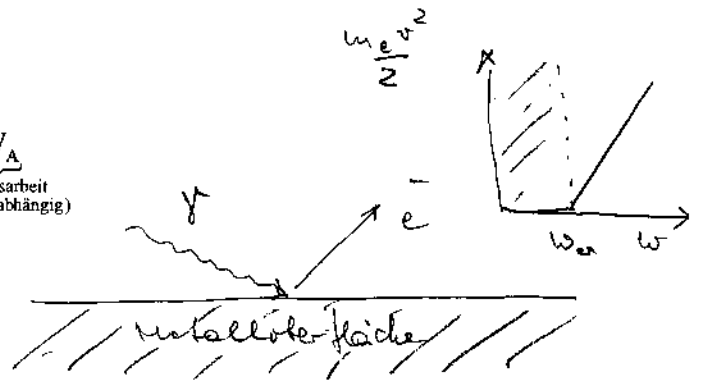
- Photoeffekt

H. Hertz findet 1887 bei Bestrahlung der Kathode einer Röntgenröhre, dass Elektronen e^- nur für $\omega > \omega_{cr}$ emittiert werden \rightarrow langwellige (rote) Grenze. Aus der Sicht der Elektrodynamik und der Vorstellung von Licht als elektromagnetische Welle ist diese Befund unverständlich: die Intensität müsste $\sim (\text{Amplitude})^2$ sein, unabhängig von der Wellenlänge.

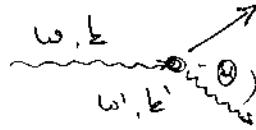
Erklärungsvorschlag von Albert Einstein (1905), Photonenhypothese: Das einfallende Licht kommt in kleinen Portionen mit der Energie $E = \hbar \omega$.

Energiebilanz: $\frac{m_e v^2}{2} = \hbar\omega - W_A$

kinetische Energie des nichtrelativistischen e^- (Messgröße) Energie des absorbierten Photons Austrittsarbeit (materialabhängig)



• Compton-Effekt



1922 beobachtet Compton bei der Streuung von Röntgenstrahlen an Metallfolien (\rightarrow inelastische Streuung eines Photons an einem e^-) eine Wellenlängenänderung

$\lambda - \lambda' \sim (1 - \cos\theta)$.

Eine einfallende elektromagnetische Welle würde ein zeitlich veränderliches Dipol induzieren, dass mit $I \sim (1 + \cos^2\theta)$ abstrahlen würde (\rightarrow Hertz'scher Dipol). Die Unterschiede in der Wellenlänge bleiben unklar.

Interpretation von Compton und Debye: Röntgenstrahlen bestehen aus Photonen mit $E = \hbar\omega$ und $\underline{p} = \hbar\underline{k}$

Bilanzen bei der inelastischen Streuung eines Photons an einem e^- :

$$\left. \begin{array}{l} \text{Energie: } \hbar\omega = \hbar\omega' + \frac{p_e^2}{2m_e} \\ \text{Impuls: } \hbar\underline{k} = \hbar\underline{k}' + \underline{p}_e \end{array} \right\} \lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} (1 - \cos\theta)$$

■ Rechnung unter Verwendung der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung \rightarrow Übung

C: Elektronen als Teilchen

Aus der Elektrodynamik vertrautes Bild des Elektrons als Punktladung (\leftrightarrow Selbstenergie!) mit Masse m_e und Ladung $-e$.

D: Elektronen als Wellen

Experimente von Davisson und Germer (1927) zur Elektronenbeugung am Kristallgitter (Ni) ergaben ein Interferenzbild, sobald die Wellenlänge der e^- in den Bereich der Gitterkonstanten von einigen \AA gelangte $1 \text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$.

„Welleneigenschaften“ anderer „Teilchen“:

Anton Zeilinger hat 1988 Interferenzbilder bei der Beugung von Neutronen ($m_n \sim 2000 m_e$) am Doppelspalt mit Gitterkonstanter $a \sim 0.1 \text{ mm}$ (makroskopisch!) und im Jahre 2000 unter Verwendung von Fullerenen (Bälle aus 70 C-Atomen) nachgewiesen.

Fazit: **de Broglie (1923): Welle-Teilchen-Dualismus** quantenmechanischer Objekte

Alle „Teilchen“ haben „Welleneigenschaften“ (und umgekehrt).

Für freie Teilchen wird die Zuordnung

$$\left. \begin{array}{l} E = \hbar \omega, \quad \underline{p} = \hbar \underline{k} \text{ "Teilchenbild"} \\ \psi(\underline{r}, t) = \psi_0 e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)} \text{ "Wellenbild"} \end{array} \right\} \text{ de Broglie-Relationen} \quad (1.1)$$

postuliert.

In Abhängigkeit von der experimentellen Situation werden das Teilchenbild mit Impuls und Energie der Teilchen des Strahls oder das Wellenbild mit Frequenz und Wellenzahl der Welle zur Erklärung der experimentellen Befunde herangezogen.

	„Wellenexperiment“ z.B. Beugung am Doppelspalt	„Teilchenexperiment“ z.B. Compton- oder Photoeffekt
Licht	ω, \underline{k} mit $\omega = c k$	$E = \hbar \omega, \quad \underline{p} = \hbar \underline{k}$ mit $E = c p$
Elektron	$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \underline{k} = \frac{\underline{p}}{\hbar}$ mit $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m_e}$	E, \underline{p} mit $E = \frac{p^2}{2m_e}$ oder $E = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2}$

numerische Abschätzungen:

■ Sandkorn: $v \approx 1 \text{ mm s}^{-1}$, $m \approx 10^{-6} \text{ g}$ ergibt $\lambda = \frac{h}{p} \approx 6 \cdot 10^{-22} \text{ m}$. Zum Vergleich:

Protonendurchmesser $\approx 10^{-15} \text{ m} \rightarrow$ makroskopische Körper haben extrem kleine de Broglie-Wellenlängen

■ niederenergetische e^- mit $\frac{p^2}{2m_e} \approx 1 \text{ eV}$... $\lambda = \frac{h}{p} \approx 10^{-9} \text{ m} \approx 10 \text{ \AA}$ \rightarrow solche e^- können bei

Beugung an Kristallen mit Gitterkonstanten von einigen \AA Interferenzbilder erzeugen.

1.2 Die Schrödinger-Gleichung (SG)

A: (Kräfte)freie Teilchen

Eine (1D)ebene Welle $u(x, t) = u_0 e^{i(kx - \omega t)}$ löst die lineare Wellengleichung (EH-Dynamik im

Vakuum) $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$, wenn $(ik)^2 - \frac{(i\omega)^2}{c^2} = 0$, also $\omega = c k$ bzw. $\frac{E}{\hbar} = c \frac{p}{\hbar}$ oder $E =$

$c p$ gilt. Das ist die relativistische E-p-Beziehung für Teilchen ohne Ruhemasse, wie die Photonen.

Frage: Welche Form besitzt eine Wellengleichung für freie nichtrelativistische Teilchen mit

der E-p-Beziehung $E = \frac{p^2}{2m}$, deren Lösung ebene de Broglie-Wellen $\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$

sind?

Für $E = \frac{p^2}{2m}$ ist wegen $E = \hbar \omega$ und $p = \hbar k$ nicht wie oben $\omega \sim k$, sondern $\omega \sim k^2$. Deshalb

versuchen wir den Ansatz $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \alpha \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0$. Für α ergibt sich $(ik)^2 + i\alpha\omega = 0$. Daraus folgt

$\hbar \omega = \frac{\hbar k^2}{i\alpha} = \frac{\hbar^2 k^2}{i\alpha \hbar}$, also $\hbar \omega = E = \frac{p^2}{i\alpha \hbar}$ d.h. $i\alpha \hbar = 2m$ somit $\alpha = -\frac{2m}{\hbar} i$.

Insgesamt erhalten wir

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \text{ mit der Lösung } \underline{\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(k \cdot x - \omega t)}} \text{ f\u00fcr } \underline{\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}} \text{ bzw. } \underline{E = \frac{p^2}{2m}}.$$

Diese Gleichung beschreibt ein freies nichtrelativistisches „quantenmechanisches Teilchen“ (qmT) als ebene Welle mit der nichtlinearen Dispersionsrelation $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$, der wegen der de Broglie-Relationen die gew\u00fcnschte Energie-Impuls-Beziehung $E = \frac{p^2}{2m}$ entspricht.

B: Schr\u00f6dinger-Gleichung f\u00fcr die Bewegung eines qmT im \u00e4u\u00dferen Potenzial $U(\underline{r}, t)$. Statistische Interpretation der Wellenfunktion

Erwin Schr\u00f6dinger postulierte f\u00fcr diese Situation die Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\underline{r}, t) + U(\underline{r}, t) \psi(\underline{r}, t) \quad \rightarrow \text{Schr\u00f6dinger-Gleichung (1.2)}$$

f\u00fcr die i.a. komplexe Wellenfunktion (WF) $\psi(\underline{r}, t)$. Welcher Zusammenhang besteht zwischen der komplexwertigen WF und dem qmT?

- Statistische Interpretation der Wellenfunktion (WF) als Wahrscheinlichkeitsamplitude
Max Born, 1927:

$$|\psi(\underline{r}, t)|^2 d^3r = \psi(\underline{r}, t) \psi^*(\underline{r}, t) d^3r \quad (1.3)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, das qmT zum Zeitpunkt t im Volumenelement d^3r am Ort mit dem Radiusvektor \underline{r} aufzufinden/nachzuweisen.

Wegen dieser statistischen Interpretation interessieren uns nur die normierbaren L\u00f6sungen $\psi(\underline{r}, t)$ der SG (1.2), f\u00fcr die

$$\int_V d^3r |\psi(\underline{r}, t)|^2 = 1 \quad (\text{für alle } t) \quad (1.4)$$

gilt, wobei V der zugängliche Raumbereich ist. Da mit $\psi(\underline{r}, t)$ auch $\text{const} \cdot \psi(\underline{r}, t)$ Lösung von (1.2), ist die Forderung der Normierbarkeit unproblematisch, solange $\psi(\underline{r}, t)$ quadratisch integrierbar ist.

Die statistische Interpretation der Wellenfunktion ist eine der Ursachen der „konzeptionellen Schwierigkeiten“ der QM (vgl.: Unschärferelation, s.u.)

• Statistische Interpretation und Zeitinvarianz

KM: NBG $m \frac{d^2 \underline{r}}{dt^2} = \underline{F}$ für die Bahnkurve $\underline{r}(t)$ ist invariant gegen Zeitumkehr $t \rightarrow -t$: Mit der Bewegung $\underline{r}(t)$ („Film vorwärts“) verstößt auch die Bewegung $\underline{r}(-t)$ („Film rückwärts“) gegen kein einziges Gesetz der KM.

QM: Mit $\psi(\underline{r}, t)$ ist auch $\psi^*(\underline{r}, -t)$ (nicht jedoch $\psi(\underline{r}, -t)$!) Lösung der SG, denn diese ist invariant unter $t \rightarrow -t$ bei gleichzeitiger komplexer Konjugation. Damit ist die für die Messung relevante Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte invariant gegenüber Zeitumkehr, denn

$$\psi(\underline{r}, t) \psi^*(\underline{r}, t) \xrightarrow{t \rightarrow -t} \psi(\underline{r}, -t) \psi^*(\underline{r}, -t) = \psi^*(\underline{r}, -(-t)) \psi^{**}(\underline{r}, -(-t)) = \psi^*(\underline{r}, t) \psi(\underline{r}, t).$$

Damit beschreibt auch die SG eine reversible Zeitentwicklung.

• Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte

Nach einfachen Umformungen erhält man aus der SG $\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$

also

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{j} = 0 \quad \text{mit } w := \psi^* \psi \quad \text{und } \underline{j} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla \cdot (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi). \quad (1.5)$$

Gleichung (1.5) ist die Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte w , d.h. \underline{j} gibt die Wahrscheinlichkeitsstromdichte an. Die Kontinuitätsgleichung kann als lokale Formulierung der Normierungsbedingung (Erhaltung der Wahrscheinlichkeit) interpretiert werden.

Beweis: Übung

• **Bewegung im zeitunabhängigen Potenzial/konservativen Feld**

$$\text{SG: } i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(\underline{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \tilde{\psi}(\underline{r}, t) + U(\underline{r}) \tilde{\psi}(\underline{r}, t)$$

Zur Trennung der Variablen Separationsansatz: $\tilde{\psi}(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}) T(t)$

$$i\hbar \psi \frac{dT}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} T \nabla^2 \psi + U \psi T \quad \left| : \psi T \neq 0 \rightarrow \underbrace{i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt}}_{\underline{r}\text{-unabhängig}} = \underbrace{\frac{1}{\psi} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi \right)}_{t\text{-unabhängig}} = \text{const} =: E$$

$$\text{Linke Seite der Gleichung: } i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = E \rightarrow T(t) = T_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$$

Vergleichen wir das mit dem de-Broglie-Postulat $\psi(\underline{r}, t) = \psi_0 e^{i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t)}$ für das freie qmT folgt $E = \hbar \omega$, d.h., die Separationskonstante entspricht der Energie.

Der r -abhängige Anteil der Wellenfunktion genügt der Gleichung (rechte Seite)

$$\underline{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\underline{r}) + U(\underline{r}) \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r})} \rightarrow \underline{\text{stationäre Schrödinger-Gleichung}} \quad (1.6)$$

FAZIT: Bei Bewegung im zeitunabhängigen Potenzial ist die WF $\tilde{\psi}(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$, wobei $\psi(\underline{r})$ die Lösung der stationären SG und E die (zulässigen Werte für die) Energie des qmT sind. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist zeitunabhängig

$$|\tilde{\psi}(\underline{r}, t)|^2 = \tilde{\psi}(\underline{r}, t) \tilde{\psi}^*(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi^*(\underline{r}) e^{+\frac{i}{\hbar}Et} = \psi(\underline{r}) \psi^*(\underline{r}) = |\psi(\underline{r})|^2 \rightarrow \text{stationäre Zustände}$$

FAZIT: (1.2) bis (1.4) bilden die Basis der Schrödinger'schen Wellendynamik. Es hat sich gezeigt, dass sie nichtrelativistische Teilchen ohne Spin korrekt, also im Einklang mit dem Experiment, beschreiben.