

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 mit quantenmechanischen Probleme 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 Emmissionsspektren)
- 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

Eine Welle ist ein aus der Experimentalphysik/Elektrodynamik vertrautes 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 ; sowie u.U. mit Ruhemasse m_0 , Ladung q , Spin s , usw.

• Hohlraumstrahlung (Max Planck, 1900):

Hypothese, die Energie des elektromagnetischen Feldes sei in Einheiten $\Delta E = \hbar \omega$ portioniert
→ gequantelt erklärt die Frequenzverteilung der Hohlraumstrahlung

$$u(\omega; T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{kT}} - 1} \quad \text{Planck'sche Strahlungsformel, Geburtsstunde der Quantenphysik}$$

Die Planck'sche Strahlungsformel enthält die bereits vorher experimentell bestätigten Grenzfälle für kleine ω ($u \sim \omega^2 \rightarrow$ Rayleigh/Jeans), für große ω , sowie 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 unverstandlich: die Intensitat musste $\sim (\text{Amplitude})^2$ sein, unabhangig von der Wellenlange.

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

Energiebilanz:
$$\underbrace{\frac{m_e}{2} v^2}_{\substack{\text{kinetische Energie des} \\ \text{nichtrelativistischen } e^- \\ \text{(Messgroe)}}} = \underbrace{\hbar \omega}_{\substack{\text{Energie des} \\ \text{absorb. Photons}}} - \underbrace{W_A}_{\substack{\text{Austrittsarbeit} \\ \text{(materialabhangig)}}$$

- Compton-Effekt

1922 beobachtet Compton bei der Streuung von Rontgenstrahlen an Metallfolien (\rightarrow inelastische Streuung eines Photons an einem e^-) eine Wellenlangenanderung

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

Eine einfallende elektromagnetische Welle wurde ein zeitlich veranderliches Dipol induzieren, dass mit $I \sim (1 + \cos^2 \theta)$ abstrahlen wurde (\rightarrow Hertz'scher Dipol). Die Unterschiede in der Wellenlange bleiben unklar.

Interpretation von Compton und Deby: Rontgenstrahlen bestehen aus Photonen mit $E = \hbar \omega$ und $\underline{p} = \hbar \underline{k}$.

Energie- und Impulsbilanz 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 → 2.

Übungsblatt

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). Besser: QmO können sich in Abhängigkeit von den experimentellen Bedingungen wellen- oder teilchenartig verhalten.

Für freie Teilchen wird die Zuordnung postuliert:

$$\left. \begin{array}{l} E = \hbar \omega, \quad \underline{p} = \hbar \underline{k} \quad \text{"Teilchenbild"} \\ \Psi(\underline{r}, t) = \Psi_0 e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)} \quad \text{"Wellenbild"} \end{array} \right\} \text{de Broglie-Relationen.} \quad (1.1)$$

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

einige 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 etwa Protonendurchmesser $\approx 10^{-15} \text{ m}$ → makroskopische Körper haben extrem kleine [de Broglie-Wellenlängen](#)

- niederenergetische Elektronen (e^-) mit $\frac{p^2}{2m_e} \approx 1 \text{ eV}$... $\lambda = \frac{h}{p} \approx 10^{-9} \text{ m} \approx 10 \text{ \AA}$

→ 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 müsste eine Wellengleichung für freie Teilchen mit der E-p-Beziehung

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

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

Insgesamt erhalten wir

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

Diese Gleichung beschreibt ein freies nichtrelativistisches ($E = \frac{p^2}{2m}$) „quantenmechanisches

Teilchen“ (qmT) als ebene Welle mit der nichtlinearen Dispersionsrelation $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$, der

wegen der de Broglie-Relationen die gewünschte Energie-Impuls-Beziehung $E = \frac{p^2}{2m}$

entspricht.

**B: Schrödinger-Gleichung für die Bewegung eines qmT im äußeren Potenzial $U(\underline{r},t)$.
Statistische Interpretation der Wellenfunktion**

Erwin Schrödinger postulierte für diese Situation die Gleichung

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

für 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 Lösungen $\psi(\underline{r},t)$ der SG (1.2), für 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.)