

Quantenmechanik I

(G3)

SS 2025

4 SWS

0. Einführung

Historie $\rightarrow$ power point Folien

- M. Planck (1900): Quantenhypothese d. Lichts

$$E = n h \omega \quad n \in \mathbb{N}$$

ω - Frequenz des Lichtes
 h - Naturkonstante

- C.J. Davisson, L.H. Germer (1927)

Elektronenbeugung am Kristall

$\rightarrow$ power point + Experiment

- L. de Broglie (1924) E. Schrödinger (1926)

Welle - Teilchen Beziehung

$$(1) \quad \boxed{\vec{p} = \hbar k \quad E = \hbar \omega} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Teilchen können sich wie Wellen verhalten

Bspl: ➤ Elektron $m_e = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$

Beschleunigung durch Spannung U

$$eU = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

$$U = 100 \text{ V} \quad \Rightarrow \quad \lambda \approx 1.2 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

➤ Staubkorn $m = 10^{-9} \text{ kg} = 1 \mu\text{g}$

$$v = 10 \frac{\text{m}}{\text{s}} \quad \Rightarrow \quad \lambda = 6.6 \cdot 10^{-26} \text{ m}$$

kaum messbar!

- Wenn Teilchen Wellencharakter haben, was ist die Wellengleichung?

→ Analogie zur Elektrodynamik

$$(2) \quad \left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \vec{E}(\vec{r}, t) = 0$$

mit Superposition ebener, monochromatischer Wellen

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \int d^3 \vec{k} \vec{E}_0(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

ergibt sich die Dispersionsrelation

$$(3) \quad \left(-k^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right) \vec{E}_0(\vec{k}) = 0 \quad \forall \vec{k}, \omega$$

$$(4) \Rightarrow k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$$

mit $E = \hbar \omega$ und $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ ist Gl. (3) äquivalent zu

$$(5) \quad \left(\vec{p}^2 - \frac{E^2}{c^2} \right) = 0$$

Vergleich zwischen (2) und (5) $\Rightarrow$

$$(6) \quad \boxed{\vec{p} \leftrightarrow -i\hbar \vec{\nabla}}$$

$$\boxed{E \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}}$$

Nun freies Teilchen $E = \frac{p^2}{2m}$

Dispersionsrelation
(7)

$$\hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$\Rightarrow$

(8)

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t)$$

$\Rightarrow$ Dynamik folgt der Schrödinger Gleichung

- lineare, partielle Differentialgleichung für komplexwertige Wellenfunktion

- wegen Linearität $\Rightarrow$ Superpositionsprinzip

(9)

$\psi_A(\vec{r}, t)$ und $\psi_B(\vec{r}, t)$ Lösungen

$\Downarrow$

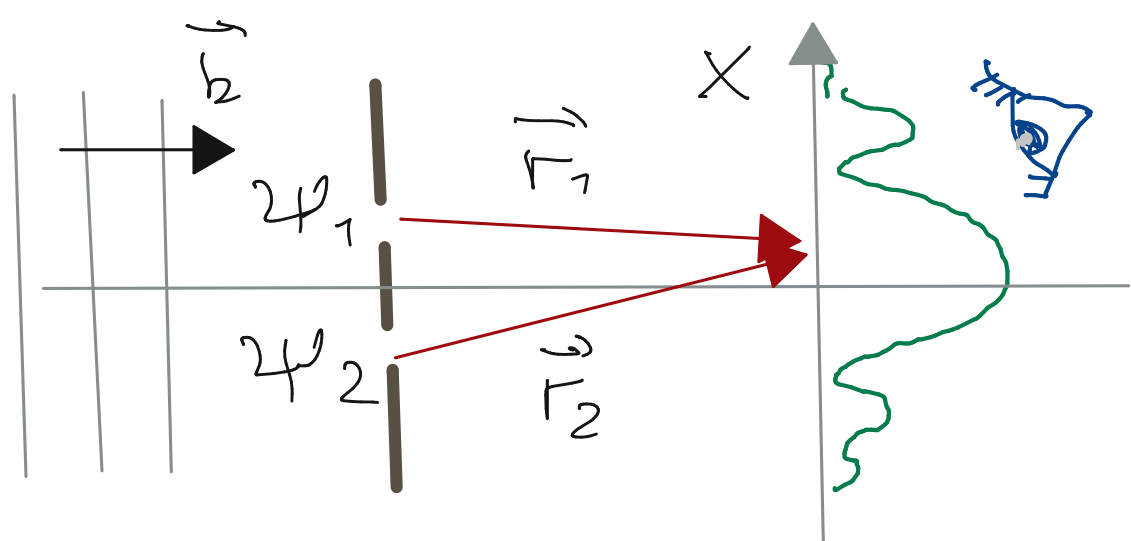
$\alpha \psi_A(\vec{r}, t) + \beta \psi_B(\vec{r}, t)$ Lösung!

d.h.
$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}$$

- Was ist die Bedeutung von $\psi(\vec{r}, t)$?

$\rightarrow$ Video: Atome am Doppelspalt

- $\psi(\vec{r}, t)$ ist selber keine meßbare Größe wie das elektrische oder magnetische Feld
- $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ ist Wahrscheinlichkeitsdichte das Teilchen zur Zeit t am Ort $\vec{r}$ zu messen



$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1 e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + \psi_2 e^{i\vec{k}\vec{r}_2} \right]$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{|\psi_1|^2}{2} + \frac{|\psi_2|^2}{2} + \frac{1}{2} \left(\psi_1^* \psi_2 e^{i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} + \text{c.c.} \right)$$

$$\psi_1^* = \psi_1 = \psi_2^* = \psi_2 = \psi_0 \quad \text{OBdA}$$

$$|\psi(x, t)|^2 = |\psi_0|^2 \left[1 + \cos(\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)) \right]$$

Wahrscheinlichkeitsinterpretation erfordert
Normierung

$$(10) \quad \int_{-\infty}^{\infty} d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1 \quad \forall t$$

$\Rightarrow$ Kontinuitätsgleichung

1D

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \psi^* \dot{\psi} + \dot{\psi}^* \psi$$

$$\stackrel{\text{Gl. (8)}}{=} -i \frac{\hbar}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) \psi + \frac{i \hbar}{2m} \psi^* \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right)$$

$$= -i \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$$

3D

$$(11) \quad \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \frac{\hbar}{2mi} \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = 0$$

$$(12) \quad \boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0} \quad \text{kontinuitätsgleichung}$$

$$(13) \quad \rho = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \quad \text{Wahrscheinlichkeitsdichte}$$

$$(14) \quad \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

Wahrscheinlichkeitsstromdichte

Erhaltungssatz (analog zu Erhaltung)

$$(15) \quad \underbrace{\frac{d}{dt} \int_V d^3r \rho(\vec{r}, t)}_{\text{Änderung der Wahrscheinlichkeit im Volumen } V} = - \underbrace{\int_V d^3r \vec{\nabla} \cdot \vec{j}}_V = - \underbrace{\int_{\partial(V)} d\vec{r} \cdot \vec{j}}_{\partial(V)} \quad \uparrow$$

Gesamtwahrscheinlichkeitstrom durch Oberfläche

- Ist die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit Ausdruck einer kontinuierlichen Symmetrie? (Noether-Theorem) $\rightarrow$ Ja!

$$\psi(\vec{r}, t) \longrightarrow \psi(\vec{r}, t) e^{i\phi}$$

kontinuierliche Symmetrie

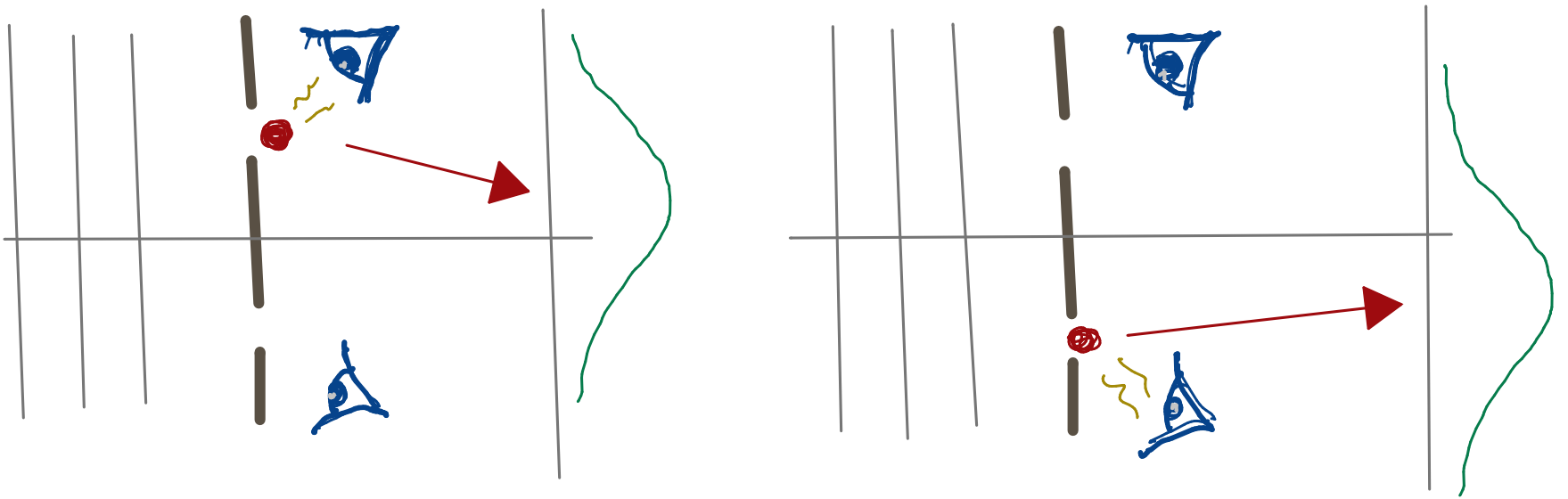
Damit die Theorie diese Symmetrie haben kann, muß die Wellenfunktion komplexwertig sein! Die Physik hängt nicht von einer globalen Phase der Wellenfunktion ab.

- Messung in der Mikrowelt?

$\rightarrow$ noch mal Video: Atome am Doppelspalt

Atome treffen zeitlich voneinander getrennt d.h. einzelnd und nur an einem Ort auf dem Schirm auf!

Wenn die Atome stichpunktartige Objekte sind, woher "weiß" das Atom von der Existenz eines zweiten Spaltes?



Bei einer Beobachtung direkt hinter dem Spalt kann das Atom sicher nichts vom zweiten Spalt "wissen"
 $\Rightarrow$ es sollte keine Interferenz auftreten

Das ist nur konsistent wenn wir erlauben:

Messungen beeinflussen das Mikrosystem

Jetzt haben wir genügend physikalische Vorarbeit geleistet um eine Theorie der Mechanik mikroskopischer Objekte axiomatisch zu formulieren.

- (i) Der Zustand eines mikroskopischen Objektes wird durch eine komplexwertige Größe charakterisiert die dem Superpositionsprinzip genügt (Interferenzbarkeit) und eine Wahrscheinlichkeitsinterpretation erlaubt.
- (ii) Die Dynamik soll durch die Schrödingergleichung beschrieben werden

(iii) Wir müssen zulassen, daß Messungen den Zustand des Objektes ändern können

Eine axiomatische Formulierung der Quantenmechanik mittels der oben eingeführten Wellenfunktion ist möglich aber nicht allgemein genug. Um eine etwas allgemeinere Formulierung zu finden betrachten wir etwas Mathematik

Vektorraum komplexwertiger Funktionen

► $f(x)$ Funktion(einer) Variablen x mit

$$\exists \int_a^b dx |f(x)|^2 \quad \int_a^b dx f(x)$$

• bilden einen linearen Raum

$$f_1(x), f_2(x) \quad f(x) = \alpha f_1(x) + \beta f_2(x) \text{ ist Funk.}$$

• Skalarprodukt

$$(16) \quad \langle g | f \rangle = \int_a^b dx g^*(x) f(x)$$

$$(17) \quad \text{• Norm} \quad \| |g\rangle \| = \langle g | g \rangle = \int_a^b dx |g(x)|^2 \geq 0$$

• $\exists$ Basissatz z.B. orthogonale Polynome $\mathcal{L}^{(2)}[-1,1]$

Legendre Polynome

$P_n(x)$

$$P_0(x) = 1$$

$$P_1(x) = x$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \dots$$

$$\int_{-1}^1 dx P_n(x) P_m(x) = \delta_{nm} \quad \text{Orthogonalität}$$

$$\sum_n \frac{2n+1}{2} P_n(x) P_n(x') = \delta(x-x') \quad \text{Vollständigkeit in } [-1,1]$$

$\Rightarrow$ jede Funktion $\in \mathcal{L}^{(2)}[-1,1]$ kann durch Legendrepolynome ausgedrückt werden

$$f(x) = \int_{-1}^1 dx' f(x') \delta(x-x')$$

$$= \sum_n P_n(x) \underbrace{\int_{-1}^1 dx' f(x') \frac{2n+1}{2} P_n(x')}_{C_n} = \sum_n C_n P_n(x)$$

Dies legt nahe, die Quantenmechanik anstelle von Wellenfunktionen allgemeiner durch abstrakte Vektoren zu formulieren

$$\psi(x) \longrightarrow |\psi\rangle$$