Vorlesung 6:

Roter Faden:

Schrödingergleichung

Messungen in der Quantenmechanik

Folien auf dem Web:
http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~deboer/

Welle – Teilchen Dualismus

Jede Welle (Licht, Schall, etc ...) zeigt Teilcheneigenschaften
(Photonen, Phononen etc ...)
Jedes Teilchen (Elektron, Atom etc ...) zeigt Welleneigenschaften
(deBroglie Wellen, Beugung, Interferenz)

Welle: Wellenlänge, Frequenz, Dispersion
Superposition, Interferenz
Teilchen: Impuls, Energie, Stoss, 'Klick'

- Wellenpaket
- Heisenberg'sche Unschärferelation
- Interferenz
- Tunneleffekt, Quantenreflexion
- Grundzustandsenergie in Potenzial
- Licht: Lichtdruck, Photoeffekt, Comptoneffekt

Materiewellen (nicht relativistisch) werden mit der Schrödingergleichung beschrieben

Aufenthaltwahrscheinlichkeit= $|\Psi|^2 dV$

Max Born schlug in 1926 vor, dass, wie bei einer elektromagn. Welle, die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen vorzufinden, gegeben wird durch die Energiedichte, d.h. das Quadrat der Amplitude der Welle oder $|\Psi|^2 dV$ ist die Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Volumen dV zu finden (und das Integral über dV ist natürlich 1, da das Teilchen irgendwo sein muss.

Schrödinger hat eine Wellengleichung $\Psi(x,t)$ für Teilchen mit Masse m aus der Energie der Teilchen postuliert (nicht rel.)

Problem: was ist mit Ort, Impuls oder Energie DIREKT nachdem gemessen wurden?? Dann WEISS ich z.B. den Ort, wodurch sich die Aufenthaltwahrscheinlichkeit auf 1 erhöht hat! Dies muss sich wiederspiegeln in der Amplitude der Wellenfkt, d.h. Wellenfkt. muss sich ändern durch eine Messung. Dieser „Kollaps“ der Wellenfkt auf eine feste Wahrscheinlichkeit wird in der QM durch Operatoren bewirkt, d.h. jede Messung ist verbunden mit einem bestimmten Operator!

Die Schrödingergleichung - Eine "Herleitung"

http://www.pci.tu-bs.de/aggericke/PC3/Kap_II/Schroedinger_Herleitung.htm

Ebene Welle: $\phi = Ae^{-i\omega t+ikx}$ mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ Oder $\psi = Ae^{\frac{-iE}{\hbar}t + \frac{ip}{\hbar}x}$

E=hν=ħω
p=h/λ=ħk

Es gilt:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{-iE}{\hbar}\cdot Ae^{\frac{-iE}{\hbar}t + \frac{ip}{\hbar}x} \rightarrow (i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t})\psi = E\psi$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{ip}{\hbar}\cdot Ae^{\frac{-iE}{\hbar}t + \frac{ip}{\hbar}x} \rightarrow (\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x})\psi = p\psi$$

D.h. Ableitung der Wellenfkt. nach der Zeit -> Eψ
und Ableitung der Wellenfkt. nach dem Ort -> pψ
Dies ergibt offensichtlich Operatoren für E und p.

Energie	E	→	$i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial t}$	Energieoperator ≡ **H**
Impuls	p	→	$\frac{\hbar}{i}\cdot\frac{\partial}{\partial x}$	Impulsoperator ≡ **p**
Ort	x	→	**x**	

zur Kennzeichnung von Operatoren verwenden wir **fette** Symbole

Weitere Operatoren

klassisch	Operator
$\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$	$\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i}(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$
$E = \frac{p^2}{2m} + V$	$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ **Laplace Operator** $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$
$L_x = yp_z - zp_y$	$\mathbf{L_x} = \frac{\hbar}{i}(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})$
$L_y = zp_x - xp_z$	$\mathbf{L_y} = \frac{\hbar}{i}(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})$
$L_z = xp_y - yp_x$	$\mathbf{L_z} = \frac{\hbar}{i}(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})$

Schrödingergleichung

$E_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$ und multiplizieren die Gleichung mit Ψ $\frac{p^2}{2m}\psi + V(x)\psi = E\psi$

Ersetzen wir E und p durch die Operatoren ergibt uns:

zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (eindimensionaler Fall)
$[-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V]\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$

$$\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) = -\hbar^2\Delta$$

$[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\,]\,\psi = i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi$ in 3-D

zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (dreidimensionaler Fall, Kurzschreibweise)
$\mathbf{H}\,\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi$

Lösung der Schrödingergleichung

Lösung für zeitunabhängiges Potential:

$$\psi(x,y,z,t) = \psi_u(x,y,z) \cdot e^{\frac{-iE}{\hbar}t}$$

Einsetzen:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left(\psi_u \cdot e^{\frac{-iE}{\hbar}t}\right) = E \cdot \psi_u \cdot e^{\frac{-iE}{\hbar}t}$$

Kurzschreibweise:

zeit*un*abhängigen Schrödinger-Gleichung

$$\mathbf{H}\psi_u = E\psi_u$$

Dies ist die Wellengleichung für nicht-relativistische Teilchen der Masse m.
Wichtig für stationäre Probleme wie Atome! (werden nur die zeitunabh.
SG benutzen!) Zeitabh. Lösung durch Multiplikation mit exp(-iωt) (wie oben)

Linearität, Superposition, Interferenz
2-Zustands-System

Quantenmechanik (Schrödingergleichung) ist linear.
Beliebige Überlagerungen = Superpositionen von Lösungen sind gleichwertige Lösungen.
Daher: Ein Quantensystem kann nicht nur in 'Eigenzuständen' sondern auch in allen möglichen Superpositionen sein.
Direkte folge der Superposition: Interferenz

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle$$
with
$$\sum_i |\alpha_i|^2 = 1$$

Das einfachste Beispiel um Superpositionen zu studieren ist ein 2-Zustands-System

Polarisation: Horizontal, Vertikal :

45° polarization:

equal superposition of V and H

$$|+45°\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|H\rangle + |V\rangle\right)$$
$$|-45°\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|H\rangle - |V\rangle\right)$$

σ^+ polarisation:

equal superposition of V and H
with $\pi/2$ phase shift

$$|\sigma^+\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|H\rangle + i|V\rangle\right)$$
$$|\sigma^-\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|H\rangle - i|V\rangle\right)$$

Spin: up, down

$$|\uparrow\rangle, \quad |\downarrow\rangle$$

Atom: 2 Zustände

Doppelspalt: Superposition der Zustände
+ Teilchen geht durch Spalt 1 (links)
+ Teilchen geht durch Spalt 2 (rechts)

$$|L\rangle, \quad |R\rangle$$

Überlagerung ergibt Interferenz

Messung in Quantenphysik

- Quantenphysik macht **keine** Aussagen über **Einzelereignisse**
- **Wellenfunktion** $\Psi(x,t)$ beschreibt das System
- $|\Psi|^2$ gibt die **Wahrscheinlichkeit** für ein Ereignis
  - Nur statistische Aussagen
  - Nur Aussagen über Erwartungswerte

Beispiel: Superposition

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle \qquad \text{with} \qquad \sum_i |\alpha_i|^2 = 1$$

Eine Frage die wir an das Quantensystem Stellen können:
Ist das System im Zustand $|j>$

Die Antwort die wir bekommen: Ja oder Nein (0 oder 1)
mit Wahrscheinlichkeit $|\alpha_j|^2$

$$\langle \Psi | M_j^+ M_j | \Psi \rangle = \alpha_j^+ \alpha_j = |\alpha_j|^2$$

Frage: **Wie entscheidet die Natur wo und wann ein Ereignis auftritt** ???

Quantenmechanik als **statistische Theorie**

preparation, state

measurement, observable

1000100101100110101001100101110101000100100100110

$$p(\mathbf{1}) \approx \frac{22}{49} \qquad p(\mathbf{0}) \approx \frac{27}{49}$$

QM sagt nur etwas über Wahrscheinlichkeiten aus.
Keine verbindliche Vorhersagen wie in der KM!

Messung und Interferenz

Doppelspalt Experiment

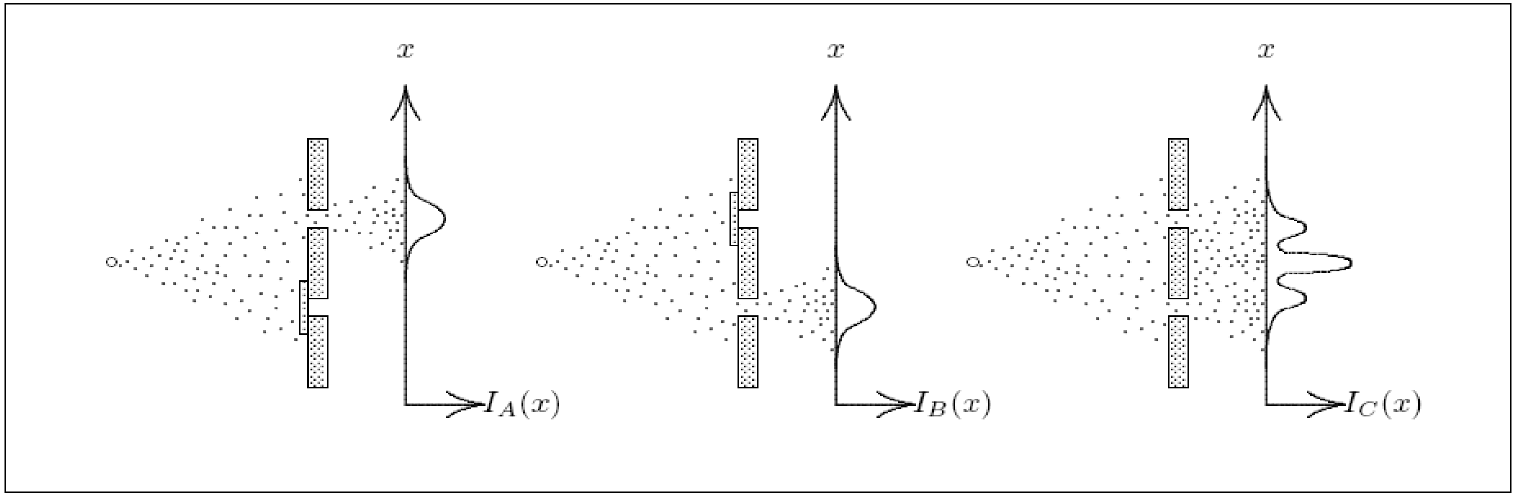


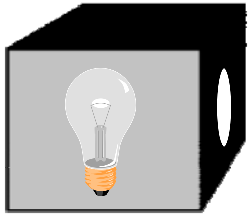
Abbildung 1.15: Das Experiment am Doppelspalt mit Elektronen.

- Im Doppelspalt Experiment gilt das **Wellenbild** (Interferenz).
- Der Nachweis des Teilchens erfolgt im **Teilchenbild**.
- Experiment mit einzelnen Teilchen (immer nur ein Teilchen zwischen Quelle und Detektor)

Frage:

- Was passiert mit der Interferenz wenn wir die **Frage nach dem Weg** des Teilchen stellen:

  Durch welchen Spalt ist das Teilchen gegangen?

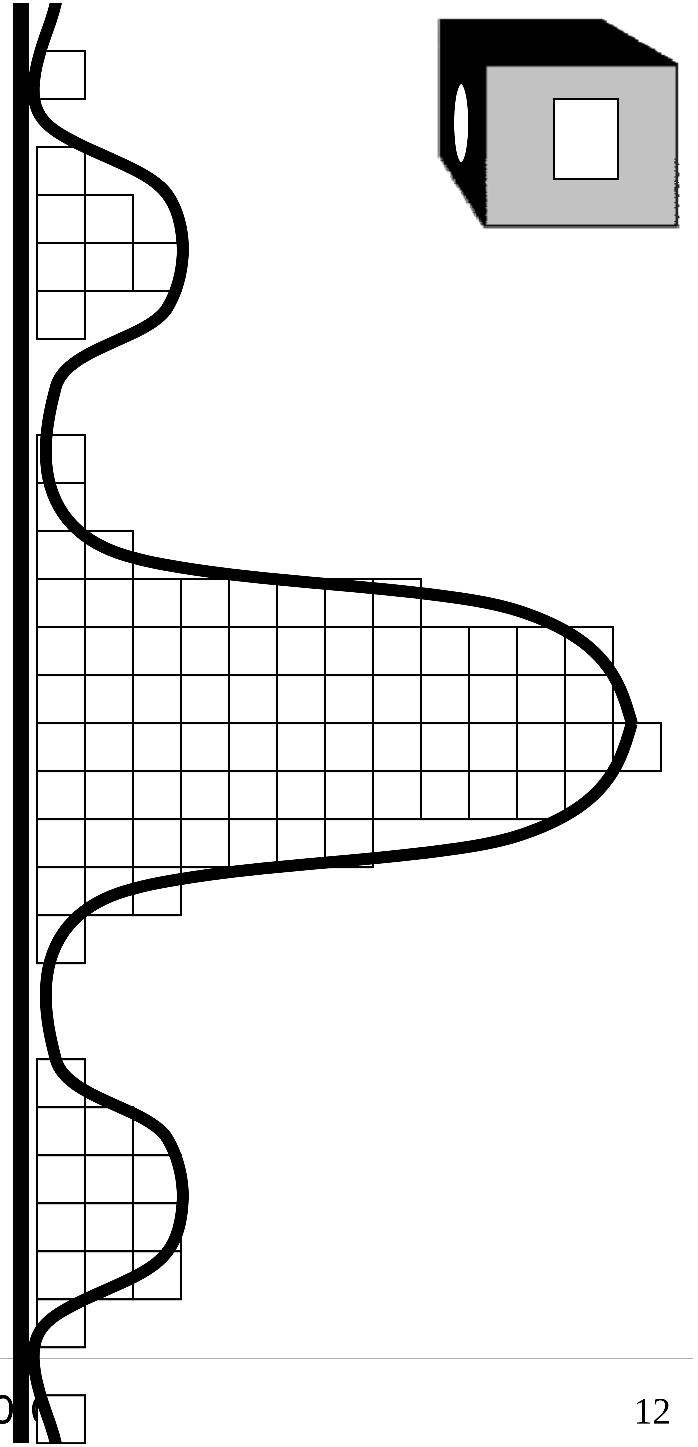


Doppelspalt

Experiment mit einzelnen Teilchen

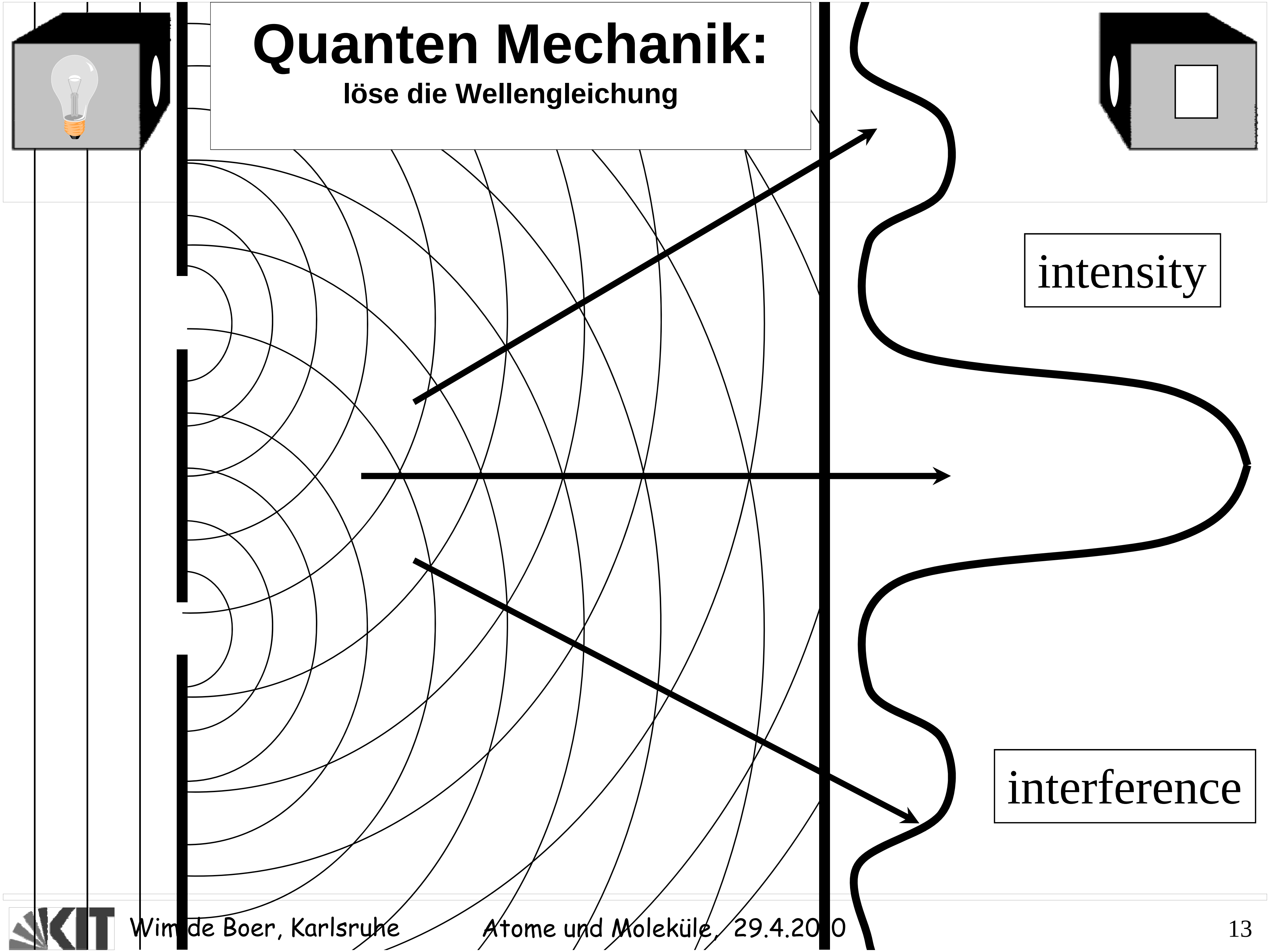
Verteilung der einzelnen Teilchen folgt Interferenz Bild!
Interferenzerscheinungen durch Unkenntnis des Weges.

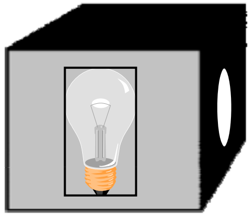
Interferenzbild hängt nicht von der Intensität ab, d.h.
Ich brauche nicht 2 Elektr. gleichzeitig! EIN Elektr. ist schon eine Welle.



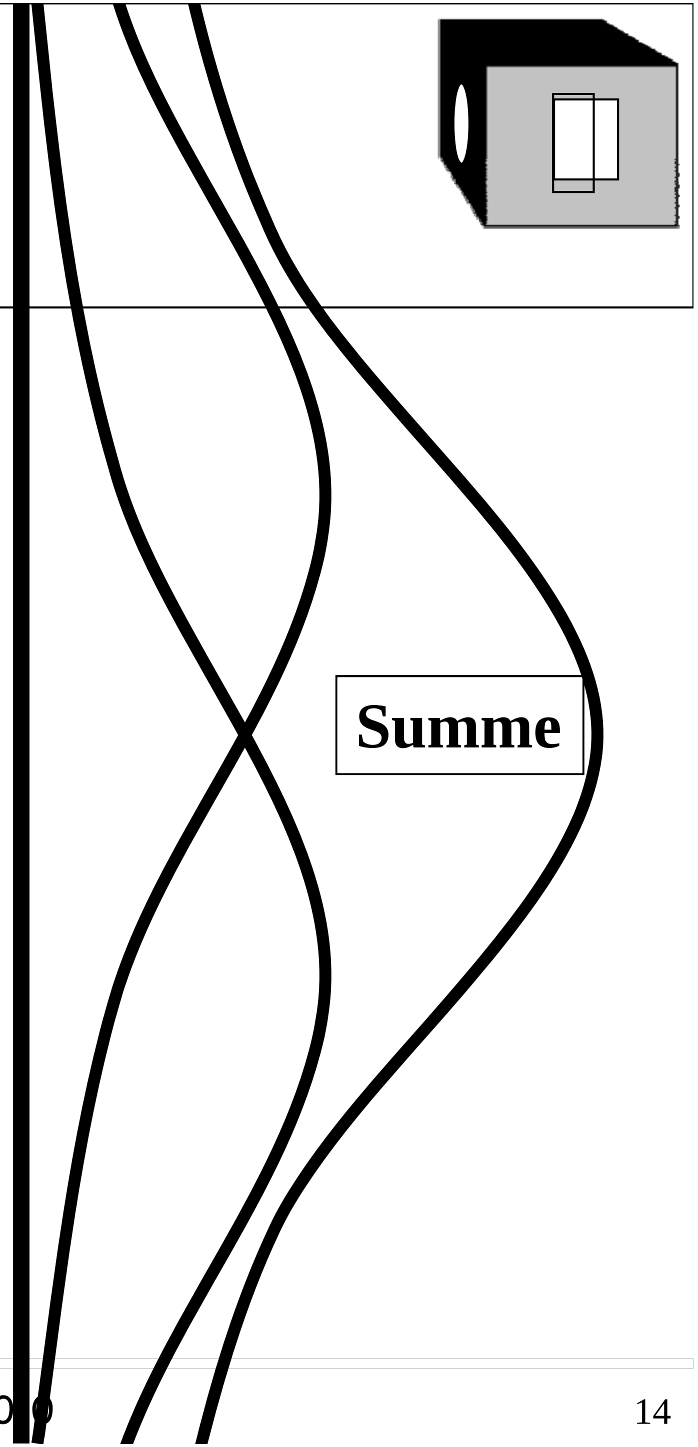
Quanten Mechanik:

löse die Wellengleichung





Ermittlung des Weges



Experimenteller Befund:
Wenn man versucht den Weg des Elektrons zu ermitteln,
-z.B. durch Comptonstreuung von Laserlicht bei Spalt 1 -
dann verschwindet die Interferenz!

D.h. Experiment erzeugt so starke Phasen- oder Orts- oder Impulsunschärfe,dass die Interferenzerscheinungen verschwinden!

hν

hν '

Was ist eine Messung?

Messung ‚projiziert' ein Quantensystem aus einer Superposition $\left|\Psi\right\rangle = \sum \alpha_i \left|\varphi_i\right\rangle$ in einen 'Eigenzustand' des Messapparates $\left|M_i\right\rangle\left|\varphi_i\right\rangle$.

Kollaps der Wellenfunktion

Mess-Problem:
Eine solche Messung kann in einer linearen Quantenmechanik nicht beschrieben werden. Die Messoperation führt zu einer Verschränkung von zu messendem System und Messapparat: $\left|\Psi\right\rangle\left|M\right\rangle \xrightarrow{\text{Messung}} \sum_i \alpha_i \left|\varphi_i\right\rangle\left|M_i\right\rangle$

Seit den 20er Jahren heftig diskutiert. Keine Lösung die nicht zumindest Input von außerhalb der Quantenmechanik benötigt.

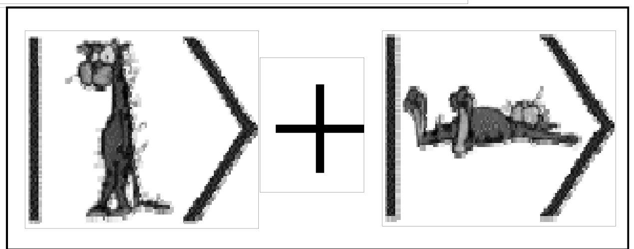
Verschiedensten Lösungsansätze, Interpretationen:

Standard Interpretation (z.B. V. Neumann, Dirac):
Separation von Quanten und Makroskopischer Welt, Messung und Quantenphysik.
Regel der Quantenphysik geben uns die Wahrscheinlichkeiten der Messresultate.
'Realität' wird erst durch die Beobachtung erzeugt.
Extremfall: Schrödingers Katze:
ohne Messung in superposition von
|lebendig> und |bewusstlos>

Schrödingers Katze

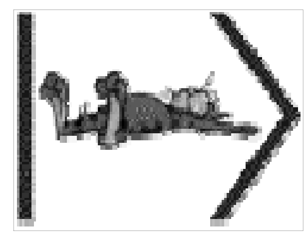
Schrödingers Katze ist ein beliebtes Beispiel um ein Phänomen anschaulich darzustellen, das in der Quantenmechanik als „Überlagerung von Zuständen`` bekannt ist. Und zwar wird bei diesem Gedankenexperiment<u>1</u> eine Katze in eine undurchsichtige Kiste gesteckt, zusammen mit einer Apparatur, die, gesteuert durch radioaktiven Zerfall, die Katze innerhalb von einer Stunde mit einer Wahrscheinlichkeit von 50% bewusstlos macht. Die Frage ist nun, in welchem Zustand sich die Katze nach einer gewissen Zeit befindet, wenn man *nicht* in die Kiste hineinschaut - analog zur Frage nach dem quantenmechanischen Zustand eines Systems, solange man keine Messung an ihm vornimmt. Erst wenn man die Kiste öffnet, manifestiert sich der Zustand in einer 100% bewussten oder 100% bewusstlosen Katze.

Vor Messung oder nach langer Wartezeit:

$\Psi=1/\sqrt{2}$ 

Superposition von Zuständen

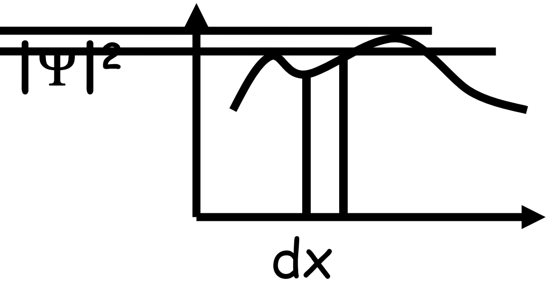
Direkt nach Messung:

$\Psi=$ 

Kollaps der Wellenfunktion

Frage: ist QM Mechanik eine komplette Theorie, d.h. kann man alle Komponenten der Wellenfkt. bestimmen?

$\int|\Psi|^2dx$ ist Wahrscheinlichkeit ein Teilchen im Intervall dx zu finden. Wenn es dort gefunden wird, WO WAR DAS TEILCHEN VORHER?



3 Antworten:

1. Realos *(z.B.Einstein)* : Teilchen war irgendwo, z.B in B; dann braucht die QM zusätzliche Angaben (“hidden” variables), die bestimmen, wie es von B nach A kommt.

2. Fundis *(Bohr etc.)*: Das Teilchen war überall und nirgends!
Die Messung zwingt das Teilchen dazu, sich zu zeigen.
(Wie Mister X im Spiel “Scotland Yard”)

3. Agnostiker *(Pauli)* : Bitte keine Spekulationen, nur Wahrnehmungen zählen!!

bis 1964: 2) bevorzugt und 3) galt nur , wenn 1) und 2) nicht akzeptiert wurden.
ab 1964: John Bell entdeckt, dass man experimentell zwischen 1) und 2) unterscheiden kann, d.h es macht ein Unterschied ob das Teilchen zuvor eine wohldefinierte Position hatte.
Experimente zeigen, dass nur 2) richtig ist .QM ist eine komplette Theorie, die keine “hidden” parameter braucht.

Zum Mitnehmen

**Die Wahrscheinlichkeit einer Messung in der QM wird gegeben durch das Quadrat der absoluten Wert einer komplexen Zahl Ψ, die man Wahrscheinlichkeitsamplitude nennt, z.B.
für die Wahrscheinlichkeit P ein Teilchen zu einer bestimmten Zeit an einem bestimmten Ort anzutreffen gilt:**

$$P=|\Psi(x,t)|^2$$

Ψ ist eine Lösung der Schrödingergleichung:

$$H\,\Psi(x,t)=E\,\Psi(x,t)$$

wobei H der Energieoperator und E die Energie ist.

**Bei stationären Zuständen gibt diese DGL eine Lösung der zugehörigen möglichen Energieniveaus der ATOMEN!
Da $E=p^2/2m$ benutzt wurde, gilt Gleichung nur für nicht-relat. Teilchen mit Masse m. Für eine relativistische Gleichung sollte man $E^2=p^2+m^2$ benutzen-> DLG mit der zweiten Ableitung nach der Zeit (=Dirac-Gleichung für eine relativistische Quantenfeldtheorie)**