2.3 Welle-Teilchen-Dualismus

- Realisierung: C. Jönsson (1961), Uni Tübingen
  [schwierig: Fabrikation des Doppelspalts, Nanotechnologie]
- Dualismus gilt für: e^-, p, n, ..., C_{60} (Fullerene, Fußbälle)
- **Folgerungen**: „Kopenhagener Deutung" der QT
  (maßgeblich von Bohr in Kopenhagen)

1. Welle-Teilchen-Dualismus (Bohrsche Komplementarität):
   a) Beide Eigenschaften sind zur Erklärung 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):

$|\Psi(\underline{r},t)|^2 d^3r$ .. Wahrscheinlichkeit, Teilchen bei $\underline{r}$ im Volumen d^3r zu finden (2.23)

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

Normierung:
$$\int\limits_{\text{gesamtes Volumen}} d^3r\, |\Psi(\underline{r},t)|^2 = 1 \qquad (2.24)$$

- 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 (Quantenelektrodynamik)

2.4. Kurze Einführung in die Wahrscheinlichkeitsrechnung

- **Def:**

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

- diskrete Verteilung: $x = x_1, x_2, \ldots, x_N$

$P(x_i)$ … Wahrscheinlichkeit für x_i

$\sum\limits_{i=1}^{N} P(x_i) = 1$ … Normierung

Bsp: Würfel $\quad x$ … Wurfzahl

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

$P(x_i) = \frac{1}{6} \quad i = 1, \ldots, 6 \longrightarrow \sum\limits_{i=1}^{6} P(x_i) = 1$

- kontinuierliche Verteilung:

$$\boxed{\begin{array}{l} x \in [x_1, x_2] \\ P(x)\,dx \ \ldots \ \text{Wahrscheinlichkeit für } [x, x+dx] \\ \int\limits_{x_1}^{x_2} P(x)\,dx = 1 \end{array}} \quad (2.26)$$

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

$$\boxed{\langle f \rangle = \int f(x)\, P(x)\, dx} \quad (2.27)$$

Bsp: Würfel:

mittlere Wurfzahl: $\langle x \rangle = \sum\limits_{i=1}^{6} x_i\, P(x_i)$

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

- n. tes Moment von $P(x)$:

$$\boxed{\langle x^n \rangle = \int x^n P(x)\, dx} \quad (2.28)$$

Mittelwert: $\langle x \rangle$

Varianz = mittlere quadratische Abweichung von $\langle x \rangle$ (2.29)

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 - \langle x \rangle^2 \rangle = \mathrm{Var}(x)$$

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

Standardabweichung: $\sqrt{\mathrm{Var}(x)}$ ... "Breite" von $P(x)$ (2.30)

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

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

s. Übungen

- Kenntnis aller $\langle x^n \rangle \longleftrightarrow P(x)$ (2.31)

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

Beweis: s. Übungen

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. linear & 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)

$$\Longrightarrow \quad \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \underline{\nabla}^2 \psi \quad \text{mit } \underline{\nabla}^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}} \quad (3.1)$$

...Laplace-Operator

• Lsg: ebene Welle: $\psi(\underline{r},t) = A e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)}$ (3.2)

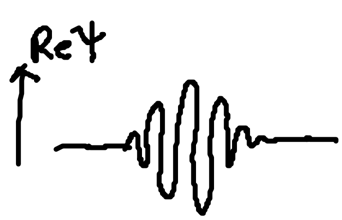
$$\xrightarrow[(3.1)]{\text{in}} \hbar\omega\psi = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)\psi \longrightarrow \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ gel.}$$

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

$\longrightarrow$ nur komplexe Wellen

3.2. Wellenpakete

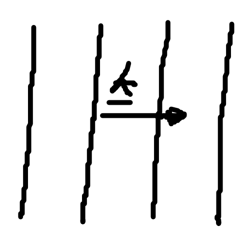
• Ziel: freies Teilchen = Wellenpaket



a) ebene Welle:

• Raum-Zeit-Punkte gleicher Phase

in (3.2): $\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t = \alpha$ ... Phase



• Phasengeschw. $\underline{v}_{ph}$: $\qquad \alpha$

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

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

mit $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \longrightarrow \boxed{\underline{v}_{ph} = \frac{\hbar k}{2m}\,\hat{\underline{k}} = \frac{\underline{p}}{2m} = \frac{\underline{v}}{2}}$ (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) $\iiint_{-\infty}^{\infty} d^3r\, |\psi(\underline{r},t)|^2$ "$=\infty$" ... nicht normierbar!

$\hat{=}\infty$ i.f. weglassen

ebene Welle ≙ idealisierter Teilchenzustand

Abhilfe zu (ii): (1) normierbare Wellenpakete

(2) endliches Volumen $V \longrightarrow A=\frac{1}{\sqrt{V}}$

b) <u>Fourier-Transformation</u> (1dim): „Entwicklung nach ebenen Wellen"

Satz: Geg.: stückweise stetiges $f(x)$

mit $\int_{-\infty}^{\infty}dx\,|f(x)| < \infty \quad (*)$

$\longrightarrow$ Fourier-Transformierte: $\bar{f}(k) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\, f(x)\,e^{-ikx}$ (3.4)

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

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

Amplitude / ebene Welle