

Theoretische Physik II - Quantenmechanik

Andreas Kurr

EW 742, Di 13-14 Sprechstunde

Anmeldung MOSES

VL Di / Mi 8¹⁵ - 9⁴⁵

EW 201

I Einführung und historischer Abriss

1.) Was bisher geschah ...

klass. Mechanik

Teilchen, Bahnen

$$\vec{r} = \vec{r}(t), \vec{p} = \vec{p}(t)$$

Newtongleichung

klass. Elektrodynamik

Wellenfelder, Intensitäten

$\vec{I}(\vec{r}, t)$, Dispersionsrelation

$$\omega = \omega(\vec{k})$$

Konzept: Teilchen + Welle stehen nebeneinander

Quantenmechanik führt zu Verknüpfung der Begriffe
(auch später QM II)

Beobachtung v. Objekten auf atomarer Skala zwingt
zur Verknüpfung der Begriffe..

2. Historischer Verlauf

• 1859 Gustav Kirchhoff: Strahlung eines Körpers bei
Temperatur T ,
Energiedichte $\rho(\omega)$ als Fkt. der Frequenz

• 1900 Max Planck: empirische Formel

$$\rho(\omega) \sim \frac{(\hbar\omega)^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (\text{TP IV})$$

↑
Boltzmann Konstante

Herleitung:

Materie als Oszillator beschrieben werden

das nur Energieportion $\Delta E = h \cdot \omega$ auf und abgeben kann

• 1905 Albert Einstein: Quantenhypothese f. Licht (Photoeffekt)

• 1907/11 Einstein, Peter Debye: spezifische Wärme

• 1923 Arthur Compton: Röntgenstrahlung verhält bei Streuung an Elektronen wie Teilchen
(Beschreibung wie Billardkugel)

Licht als Teilchen

• 1928 Davisson - Germer: Elektronbeugung an Festkörperoberflächen
Elektronen als Wellen

• 1923 de Broglie: Verbindg. v. Wellen und Teilchen Eigenschaften

Impuls - Wellenlänge: $\vec{p} = h \vec{k}$, $|\vec{k}| = \frac{2\pi}{\lambda_B}$

\vec{p} Impuls d. Teilchens \vec{k} Wellenvektor d. Welle \vec{k} de Broglie Wellenlänge

kinet. Energie - Frequenz : $\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{h}{2\pi} \omega$

\nearrow kinet. Energie d. Teilch
 \nearrow Frequenz der zugeordneten Welle

Anwandy. auf Teilchen: Wann ist Welleneigenschaft wichtig?

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{(hk)^2}{2m} = \frac{\left(\frac{h}{\lambda} \frac{2\pi}{\lambda}\right)^2}{2m} \rightarrow \lambda_B = \frac{2\pi h}{m v}$$

Wenn Objekt auf der Größenordng v. λ_B untersucht wird, wird Welleneigenschaft wichtig!

Kugelhaufel : $1 \text{ kg}, 1 \frac{\text{m}}{\text{s}} \rightarrow \lambda_B = 10^{-34} \text{ m}$

Elektron $10^{-30} \text{ kg}, 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} \rightarrow \lambda_B = 10^{-10} \text{ m} \sim 1 \text{ \AA}$

Zur Beobachtg. v. Welleneffekt mß Teilchen auf der de Broglie λ_B beobachtet werden.

• 1911 Rutherford's Atommodell

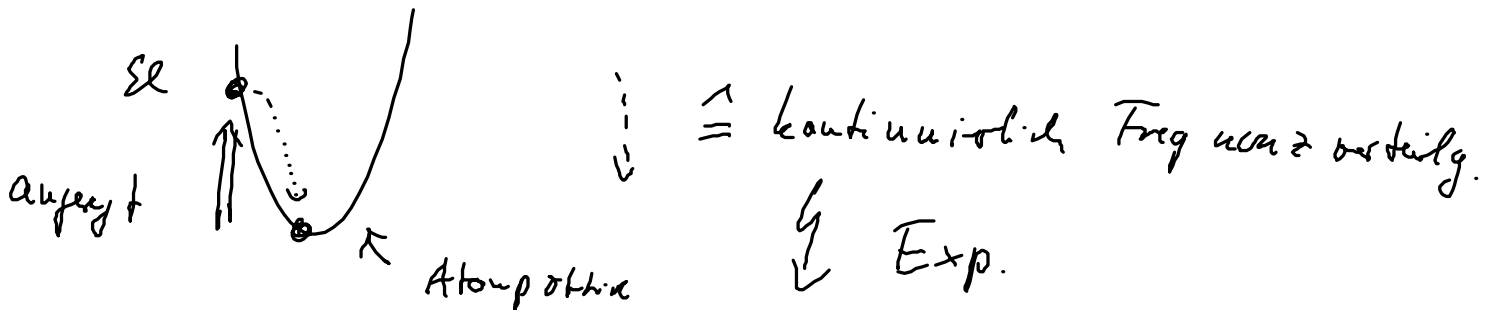
Elektron auf Bahn um kleinen Kern

→ ist große Herausforderung f. Theorie

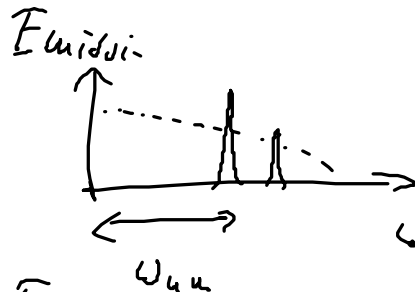
weil klass. Mech. + ED das nicht liefert

§ stabile Atome wegen Abschaltg. durch
beschleunigte Bewegung d. Elektrons

ebenso sollte bei Anregg. in klass. Potential



Experiment: diskrete Spektren



empirisch:
$$\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$$

n, k : natürlich Zahl, durch numerierbar

$$H\text{-Atom } E_n \sim \frac{1}{n^2}$$

Balmer d. H-Atoms
 =

• ab 1913: Bohr - Sommerfeld Theorie

f. Atomprobleme durch modifizierte Hamilton Theorie

Phase integral $\int d\vec{q} \cdot \vec{p}(\vec{q}) = \frac{h}{2\pi} n \rightarrow E_n = \frac{m e^4}{2\hbar^2 n^2}$

Linie-	↑ ↗	↑	
integral	Hamilton-	bestimmt die	
über	variable	erlaubte Bahnen	
periodisch			
Beh. d. Elektronen			

konnte nicht vollständig erklärt werden

• Stark- und Zeeman effekt: Aufspaltung d. Spektrallinien im elektrisch und magnetisch Feld → noch mehr unverständl. Daten

• 1925 Werner Heisenberg entwickelt Quantenmechanik

"physikalische Theorie sollte sich an beobachtbaren
Größen orientieren"

Bahnkurve $X(t)$ sollte nicht aufstecken (nicht beobachtet)

beobachtet ist ω_{um}

$$X(t) \longrightarrow X_{um}(t) = X_{um}(0) e^{i\omega_{um} t}$$

periodisch Vorgang $(u, m) \rightarrow$ Matrix

festzustellen

$$V_{um}(t) = \dot{X}_{um}(t) = i\omega_{um} X_{um}(t)$$

$$E_u = \frac{1}{\hbar} \omega_u$$

$$= i(\omega_u - \omega_m) X_{um}(t)$$

$$= i(\omega_u X_{um} - X_{um} \omega_m)$$

$$\begin{matrix} \nearrow \\ \uparrow \\ \uparrow \end{matrix} \frac{1}{\hbar} \sum_i \omega_i \delta_{iu} X_{im} = \frac{1}{\hbar} \sum_i H_{ui} X_{im}$$

$$H_{ui} = \hbar \omega_i \delta_{iu}$$

Matrixprodukt

$$\dot{\hat{X}} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{X} - \hat{X} \hat{H}) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{X}]$$

Matrixgleichung für \hat{X}

Kommutator $\equiv (\hat{H} \hat{X} - \hat{X} \hat{H})$

Was ist \hat{H} ? \hat{H} hat Bezich. zu Energie des

Bewegungsgl. d. Heisenberg QM,

und \hat{H} physikalisch für die Struktur des

insbesond. $\hat{X} = \hat{H} \rightarrow \dot{\hat{H}} = 0 \hat{=} \hat{H}$ Energie nicht in kontinuierl. System

◦ 1926: Erwin Schrödinger Hans Arosa Wellenfunktion 1925

gleichg. f. Materiewellen $\psi(\vec{r}, t)$

Idea: experimentelle Befunde und sie beziehen:

a) Interferenz v. Elektronen sollte existieren

$\rightarrow \psi = \psi_1 + \psi_2$ sollte log. sein

wenn ψ_1, ψ_2 log. sind

⇒ lineare Dgl. gesucht

b) möglichst einfach: Anfangsbeding. soll ausreichend sein, um $\psi(\vec{r}, t)$ zu bestimmen —

⇒ Dgl. 1. Ordng. in Zeit: $\psi(\vec{r}, t=0)$ als AB

c) de Broglie Beziehung soll gelten

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad \frac{\vec{p}^2}{2m} = \hbar \omega$$

an a) ebene Wellenlösung: $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$
↑
Amplitude

nach c) $\psi = \psi_0 e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - \frac{\vec{p}^2}{2m} t) \frac{1}{\hbar}}$

$$\partial_t \psi = -\frac{i}{\hbar} \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi$$

$$\nabla^2 \psi = -\frac{\vec{p}^2}{\hbar^2} \psi$$

⏟
 \vec{p}^2 eliminieren

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

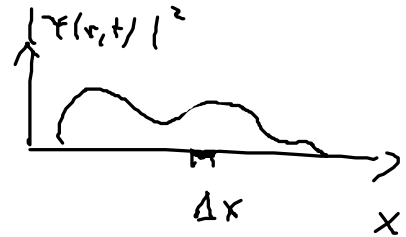
Schrödinger-Gleichung ψ
Teilchen im freien Raum

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \Delta$$

partielle Dgl. f. Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t) \rightarrow$ Interpretationsproblem
 $\psi(\vec{r}, t)$ ist komplex!

o 1926 Max Born

a) $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ ist das Maß für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des beschriebenen Objekts



b) $|\psi(\vec{r}, t)|^2 dV \hat{=} \text{Wahrscheinlichkeit Teilchen in } dV \text{ zu finden}$
(oder 1d: im Intervall dx)

c) im gesamten Raum: $\int_{V_{\text{gesamt}}} dV |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1$

Normierungsbedingung d. Wellenfunktion