

Quantenmechanik

Scans der kommentierten Folien
Sommersemester 2023

Vorlesungsskript von SS2017,
mit Anhang A.13 (2019), S.232a (2023),
und überarbeitetem Kapitel 9 (2023)

H. G. EVERTZ
W. VON DER LINDEN

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Literatur	3
1 <u>Wellen und Teilchen</u>	7
1.1 Das Doppelspaltexperiment mit klassischen Teilchen	8
1.1.1 Kugeln	8
1.1.2 Wasserwellen	9
1.2 Licht	11
1.3 Elektronen	12
1.3.1 de Broglie Wellenlänge	14
1.3.2 Experiment zur Bestimmung der Trajektorie	16
1.4 Folgerungen	17
2 <u>Zustände und Messungen</u>	19
2.1 Zustände	19
2.2 Polarisationsexperimente	21
2.2.1 Analysatoren	24
2.3 Algebraische Beschreibung	28
2.3.1 Verallgemeinerungen und Postulate	32
2.4 Teilchen mit Spin $\frac{1}{2}$	36
2.4.1 Das Stern-Gerlach Experiment	36
2.4.2 Basisvektoren für Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen	45
2.4.3 Spin $\frac{1}{2}$ Operatoren	47
3 <u>Zeitentwicklung</u>	55
3.1 Zeitentwicklungsoperator	55
3.1.1 Formale Lösung für den Zeitentwicklungsoperator	57
3.2 Korrespondenzprinzip; Wichtige Hamiltonoperatoren	59
3.2.1 Teilchen mit Spin	61
3.3 Schrödingergleichung für den Zustand	62
3.3.1 Schrödingergleichung in einer diskreten Basis	62
3.3.2 Kontinuierlicher Ortsraum: Wellenfunktion, Ortsoperator, Impulsoperator	63

INHALTSVERZEICHNIS

3.3.3	Schrödinger-Gleichung im kontinuierlichen Ortsraum	65
3.4	Stationärer Fall: Zeit-unabhängiger Hamilton-Operator	67
3.5	Zeitabhängigkeit von Erwartungswerten	70
3.5.1	Kommutierende Hamiltonoperatoren	70
3.5.2	Allgemeiner Fall	71
3.5.3	Beispiel: Spin-Präzession	72
3.6	Schrödinger-Bild und Heisenberg-Bild	74
3.6.1	Ehrenfest-Theorem: Teilchen im zeitunabh. Potential $V(\vec{x})$	77
4	<u>Eindimensionale Potentialprobleme</u>	81
4.1	Randbedingungen für die Wellenfunktion	82
4.1.1	Normierbarkeit, Spektrum	82
4.1.2	Stetigkeit	84
4.2	Konstantes Potential	87
4.3	Gebundene Zustände im Potentialtopf	88
4.3.1	Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden	88
4.3.2	Potentialtopf mit endlicher Tiefe	92
4.4	Unabhängige Freiheitsgrade: Produktansatz	98
4.5	Anwendungen: Quantentopf, Quantendraht, Quantenpunkt	101
4.6	Eigenschaften der Wellenfunktion	104
4.6.1	Untere Schranke für die Energien eines Potentialproblems	104
4.6.2	Paritätsoperator. Parität der Wellenfunktionen bei symmetrischen Potentialen	105
4.6.3	Gebundene Zustände in 1d sind nicht entartet	106
4.6.4	Zahl der Nullstellen gebundener Zustände in 1d	107
4.6.5	Existenz reellwertiger Eigenfunktionen in 1d	108
4.6.6	Wahrscheinlichkeits-Strom und Kontinuitätsgleichung	109
4.7	Freie Teilchen	112
4.7.1	Ebene Wellen	112
4.7.2	Wellenpakete	114
4.8	Streuung an einer Potentialbarriere	116
4.8.1	Allgemeine Lösung	116
4.8.2	Hohe Potential-Barriere, Raster-Tunnel-Mikroskop	123
4.8.3	Niedrige Potential-Barriere oder Potential-Mulde	125
4.8.4	Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte	127
4.9	Der Harmonische Oszillator	130
4.9.1	Methode von Dirac	131
4.9.2	Eigenzustände und Erwartungswerte	136
4.9.3	Grundzustand in der Ortsdarstellung	140
4.9.4	Angeregte Zustände in der Ortsdarstellung	142
4.9.5	Dynamik des harmonischen Oszillators	146
4.9.6	Kohärente Zustände	148

5	<u>Näherungsverfahren</u>	153
5.1	Variationsansatz	153
5.2	WKB-Näherung	157
5.3	Zeitunabhängige Störungstheorie	160
5.3.1	Nicht entartete Störungstheorie	160
5.3.2	Beispiel: Spin-1/2 Teilchen im externen Magnetfeld	165
5.3.3	Störungstheorie für (fast) entartete Zustände	168
5.4	Zeitabhängige (Diracsche) Störungstheorie	173
5.4.1	Wechselwirkungsbild (Dirac-Bild)	174
5.4.2	Störungsentwicklung der Wellenfunktion	175
5.4.3	Entwicklung in der Eigenbasis von \hat{H}_0	177
5.4.4	Übergangswahrscheinlichkeit	178
5.4.5	Harmonische oder konstante Störung	179
5.4.6	Konstante Störung: Fermis goldene Regel	180
5.4.7	Harmonische Störung mit $\Omega > 0$	185
5.4.8	Adiabatisches Einschalten der Störung	186
5.5	Zu numerischen Verfahren	188
6	<u>Symmetrietransformationen</u>	189
6.1	Zeittranslationen	189
6.2	Zu Lie-Gruppen	190
6.3	Noethersches Theorem	191
6.4	Räumliche Translationen	192
6.4.1	Translationsoperator	192
6.4.2	Blochsches Theorem	195
6.4.3	Kronig-Penney-Modell	196
6.5	Drehungen	199
6.5.1	Drehung von Spins	199
6.5.2	Bahndrehimpuls	200
6.5.3	Gesamtdrehimpuls und Vertauschungsrelationen	201
6.5.4	Eigenwertproblem von Drehimpulsoperatoren	203
6.5.5	Der Bahndrehimpulsoperator im Ortsraum	209
7	<u>Die Schrödingergleichung im Zentralfeld</u>	215
7.1	Radial- und Drehimpulsanteil	215
7.2	Produktansatz für die Schrödingergleichung	217
7.3	Wasserstoff und H-ähnliche Probleme	219
7.3.1	Entartung	225
7.3.2	Energieschema des H-Atoms ($Z=1$)	226
7.3.3	Lichtemission	226
7.3.4	Wasserstoff-Wellenfunktion	229
7.3.5	Korrekturen zum Wasserstoffspektrum	232

INHALTSVERZEICHNIS

8	<u>Anwendungen: Zwei-Zustands-Systeme</u>	233
8.1	Nicht-zeitabhängige Wechselwirkung	233
8.1.1	Doppelter Potentialtopf: Beispiel NH_3	233
8.1.2	Hamiltonoperator mit Nichtdiagonalelementen	239
8.2	Spin im konstanten + rotierenden Feld: Resonanz	240
8.2.1	NMR	243
8.2.2	MRT	244
8.3	Maser und Laser	245
9	<u>Teilsysteme: Dichtematrix, gemischte Zustände (Version 2023)</u>	247
9.1	Beispiele für Erwartungswerte in einem Teilsystem eines reinen Zustands	249
9.2	Gesamtsystem: Dichtematrix für einen reinen Zustand	250
9.3	Teilsystem: reduzierte Dichtematrix, gemischter Zustand	251
9.3.1	Unterscheidung reiner und gemischter Zustand	254
9.3.2	Schrödingergleichung für einen gemischten Zustand	255
9.4	Beispiele	256
9.4.1	Wärmebad	256
9.4.2	Unabhängiges System	256
9.4.3	Produktzustand	257
9.4.4	Verschränkter Zustand	257
9.4.5	Unpolarisierter Strahl	258
9.4.6	Unvollständige Präparation	258
10	<u>Verschränkte Zustände</u>	259
10.1	Der Messprozess	260
10.2	Dekohärenz	263
10.3	EPR-Paradoxon und Bellsche Ungleichungen	265
10.3.1	Lokale realistische Theorien (hypothetisch)	266
10.3.2	Quantenmechanische Analyse	269
10.3.3	Vergleich	271
10.4	Quanteninformation	272
10.5	Verschränkungsmaß	272
10.5.1	Schmidt-Zerlegung	273
10.5.2	Reduzierte Dichtematrix	274
10.5.3	Von Neumannsche Verschränkungsentropie	275
10.6	No-Cloning-Theorem	276
10.7	Quanten-Teleportation	277
A	<u>Vektoren und Operatoren</u>	A1
A.1	Heuristische Einführung	A1
A.1.1	Vektoren in 2 Dimensionen	A1
A.1.2	Bra- und Ket-Vektoren	A2

A.2	<u>Lineare Vektorräume</u>	A 5
A.2.1	Der lineare Vektorraum	A 5
A.2.2	Das Skalarprodukt	A 8
A.2.3	Entwicklung in einer Orthonormalbasis	A 10
A.2.4	Der Dualraum	A 11
A.2.5	Folgen und Konvergenz	A 12
A.3	<u>Lineare Operatoren</u>	A 13
A.3.1	Einheitsoperator	A 14
A.3.2	Projektionsoperator	A 15
A.3.3	Matrixdarstellung von Operatoren	A 16
A.3.4	Kommutator	A 17
A.3.5	Spur eines Operators	A 18
A.3.6	Adjungierter Operator	A 20
A.3.7	Äußeres Produkt	A 21
A.3.8	Hermitesche und Selbstadjungierte Operatoren	A 22
A.3.9	Unitäre Operatoren	A 24
A.3.10	Basistransformation („Passive Transformation“)	A 24
A.3.11	Aktive Transformation physikalischer Objekte	A 26
A.4	<u>Eigenwertprobleme in endlichdimensionalen Vektorräumen</u>	A 28
A.4.1	Eigenwerte	A 28
A.4.2	Spektraldarstellung, Funktionen von Operatoren	A 30
A.4.3	Darstellung über Matrizen	A 33
A.4.4	Determinanten	A 36
A.5	<u>Die Delta-Distribution</u>	A 37
A.5.1	δ -Distribution	A 39
A.5.2	Differentiation von Distributionen	A 41
A.5.3	Delta-Distribution mit transformiertem Argument	A 42
A.6	<u>Der Ortsraum</u>	A 44
A.6.1	Funktionen als Vektoren	A 44
A.6.2	Kontinuierlicher Ortsraum	A 46
A.6.3	Zur Spektraldarstellung	A 48
A.6.4	Der Ortsoperator	A 49
A.6.5	Spektralsatz, Erwartungswerte	A 52
A.7	<u>Der Impulsraum</u>	A 53
A.7.1	Diskrete Fouriertransformation (Fourierreihen)	A 53
A.7.2	Kontinuierliche Fouriertransformation	A 57
A.7.3	Faltungssatz und Ableitungen	A 59
A.7.4	Der Impulsraum	A 60
A.7.5	Der Impulsoperator	A 62
A.7.6	Gemischt diskret/kontinuierliche Fouriertransformation	A 66
A.8	<u>Kommutatoren</u>	A 70
A.8.1	Kommutatoren der Orts- und Impulsoperatoren	A 70
A.8.2	Gemeinsame Eigenvektoren kommutierender Operatoren	A 71

INHALTSVERZEICHNIS

A.8.3	Die Unbestimmtheitsrelation	A 76
A.9	Gaußsche Integrale	A 79
A.10	Der Hilbertraum	A 81
A.10.1	Von Neumansche Projektionsoperatoren	A 82
A.10.2	Erweiterter Hilbertraum	A 86
A.11	Singularwertzerlegung	A 88
A.11.1	Kompakte SVD	A 88
A.11.2	SVD als Summe von äußeren Produkten	A 89
A.11.3	Zusammenhang mit der Eigenwertzerlegung	A 90
A.11.4	Darstellung der SVD mit unitären Transformationsmatrizen	A 91
A.11.5	Pseudoinverse	A 92
A.11.6	Anwendungen	A 93
A.12	Ergänzungen	A 94
A.12.1	Kommutatoren	A 94
A.12.2	Baker-Hausdorff-Formeln	A 94
A.12.3	Hellman-Feynman-Theorem	A 94
A.12.4	Reine Zustände mit mehreren Freiheitsgraden	A 95
A.13	Weitere Ergänzungen (2019)	A 96
A.13.1	Allgemeiner Zeitentwicklungsoperator, Dyson-Reihe	A 96
A.13.2	Reellwertige Kombinationen der Kugelflächenfunktionen	A 101
A.13.3	Radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeiten	A 103

Einleitung

Die Quantenmechanik ist von zentraler Bedeutung für unser Verständnis der Natur. Schon einfache Experimente zeigen, wie wir sehen werden, dass das klassische deterministische Weltbild mit seinen wohldefinierten Eigenschaften der Materie inkorrekt ist. Am augenscheinlichsten tritt dies auf mikroskopischer Skala zutage, in der Welt der Atome und Elementarteilchen, die man nur mit Hilfe der Quantenmechanik beschreiben kann. Aber natürlich ist auch die makroskopische Welt quantenmechanisch, was z.B. bei Phänomenen wie dem Laser, der LED, der Supraleitung, Ferromagnetismus, bei der Kernspinresonanz (MR in der Medizin), oder auch bei großen Objekten wie Neutronensternen wichtig wird.

Einer der zentralen Punkte der Quantenmechanik ist, dass nur Aussagen über Wahrscheinlichkeiten gemacht werden können, anders als in der klassischen deterministischen Physik, in der man das Verhalten einzelner Teilchen mittels der Bewegungsgleichungen vorhersagen kann. Die entsprechende Bewegungsgleichung in der Quantenmechanik, die Schrödingergleichung, beschreibt statt deterministischer Orte sogenannte Wahrscheinlichkeitsamplituden.

Die Vorhersagen der Quantenmechanik und ihrer relativistischen Verallgemeinerung, der Quantenfeldtheorie, haben bisher jeder Überprüfung standgehalten, in letzter Zeit auch auf immer präziserer atomarer Ebene, die zuvor oft nur Gedankenexperimenten vorbehalten war. Die Struktur der Quantenmechanik macht ihre „anschauliche“ Interpretation (und damit ein anschauliches Weltbild !) zu einer schwierigen, aber auch extrem interessanten Herausforderung, deren Fragen weiterhin Gegenstand aktueller Forschung sind. In den letzten Jahren hat es eine stürmische Entwicklung in der Anwendung der experimentell immer besser beherrschbaren fundamentalen Quantenmechanik gegeben, z.B. für die Quanteninformatik.

Einleitung

tionstheorie, mit zum Teil spektakulären Experimenten („Quantenteleportation“), die zentral die nicht-lokalen Eigenschaften der Quantenmechanik nutzen. Grundlegende quantenmechanische Phänomene werden auch für speziell konstruierte Anwendungen immer interessanter, wie etwa die Quantenkryptographie oder Quantencomputer.

Diese Vorlesung vermittelt eine Einführung in die Quantenmechanik. Wir werden zunächst einige grundlegende Experimente besprechen und sehen, dass ihre Resultate uns zum Verlassen der klassischen Physik zwingen. Sie führen auch zur Struktur der Quantenmechanik. Auf diesen Grundlagen aufbauend werden wir die Schrödingergleichung behandeln und mit ihrer Hilfe quantenmechanische Probleme wie Potentialtöpfe, den harmonischen Oszillator und das Wasserstoffatom berechnen, sowohl exakt als auch mit Näherungsverfahren.

Wegen der begrenzten zur Verfügung stehenden Zeit müssen in dieser Vorlesung viele Aspekte unbeleuchtet bleiben. Es wird daher empfohlen, auch Lehrbücher zur Ergänzung und Vertiefung des Lehrstoffes zu benutzen, von denen im Folgenden einige angegeben werden.

Die benötigte und zum Teil ungewohnte Mathematik wird im Anhang dieses Vorlesungsskripts besprochen und in den ersten Wochen parallel behandelt. Für das Verständnis der Quantenmechanik und zum Erlernen quantenmechanischer Rechnungen ist das selbstständige Lösen der Übungsaufgaben besonders wichtig.

Zum Schluss dieser Einleitung noch ein Ausblick auf weitere Vorlesungen: Die Behandlung der Quantenmechanik, hinsichtlich Anwendung, Methoden und Interpretation, wird in der Vorlesung Fortgeschrittene Quantenmechanik fortgesetzt. Da die Schrödingergleichung das Verhalten von Ensembles *einzelner* Teilchen beschreibt, muss man den Formalismus für die Behandlung von Systemen vieler Teilchen erweitern. Die Fortgeschrittene Quantenmechanik wird eine Einführung in diese sogenannte Zweite Quantisierung vermitteln. Ausführlicher wird die so entstehende nicht-relativistische Vielteilchenphysik, Grundlage aktueller Forschung in der Festkörperphysik, im ersten Teil der Vorlesung Quanten und Felder behandelt. Im zweiten Teil dieser Vorlesung wird die Dirac-Gleichung besprochen, die relativistische quantenmechanische Einteilchengleichung. Als Synthese vermittelt der dritte Teil schließlich eine Einführung in relativistische Vielteilchentheorien, die Quantenfeldtheorien.

Literatur

Es gibt eine große Zahl von Büchern über die Quantenmechanik, darunter auch viele gute Einführungen. In der folgenden Auswahl werden vor allem einige Bücher erwähnt, die im Aufbau der Vorlesung ähneln oder die besonders gut zugänglich sind.

Zugang wie in der Vorlesung:

J.L. BASDEVANT, J. DALIBARD, *Quantum Mechanics*, 2005.

Sorgfältige Darstellung, die sowohl mathematische Grundlagen und konzeptionelle Fragen als auch neue Experimente und Anwendungen behandelt.

R. SHANKAR, *Principles of Quantum Mechanics*, 2011.

Mit Mathematikteil. Recht ausführlich und auch weiterführend.

M. LE BELLAC, *Quantum Physics*, 2012. Sorgfältige Darstellung, aber auf recht hohem Niveau; nicht als alleinige Einführung.

H. MITTER, *Quantentheorie*, 3. Auflage 1994.

Gut verständlich. Die Vorlesung folgt im ersten Abschnitt zum Teil diesem Buch. Themenauswahl des Buchs sehr knapp. Vergriffen. Als Postskript erhältlich unter physik.uni-graz.at/~hem.

J.J. SAKURAI, J.J. NAPOLITANO *Modern Quantum Mechanics*, 2010.

Eine der ersten Darstellungen, welche die Quantenmechanik über grundlegende Experimente aufbaut. Relativ hohes Niveau.

R.P. FEYNMAN, R.B. LEIGHTON, M. SANDS, *Feynman Vorlesungen über Physik III: Quantenmechanik*, 1988.

Literatur

Feynmans unverwechselbarer Stil mit sehr ausführlichen Erklärungen. Vorlesung von 1965. Nicht so systematisch wie andere Bücher.

L.E. BALLENTINE, *Quantum Mechanics: A Modern Development*, 2014.
Mit Mathematikteil. Etwas mathematisch formaler und anspruchsvoller als die übrigen Bücher. Diskutiert auch Interpretationsfragen und neuere Experimente. Relativ ausführlich.

A. PERES, *Quantum Theory: Concepts and Methods*, 1995.
Sehr sorgfältige Behandlung der physikalischen und mathematischen Konzepte. Enthält auch Kapitel zur Quanteninformationstheorie.

Zugang über die Schrödingergleichung:

W. NOLTING, *Grundkurs Theoretische Physik 5/1 und 5/2: Quantenmechanik*, 2013/2015.

Viele durchgerechnete Aufgaben. Mit Mathematikteil. Ausführlicher Teil zu Experimenten.

T. FLIESSBACH, *Quantenmechanik*, 2008.

Klare und recht knappe Darstellung in der Art eines Vorlesungsskriptes. Kurzer Mathematikteil. Einführung wie in dieser Vorlesung.

A. MESSIAH, *Quantenmechanik I,II*, 1991.

Ein Standardwerk. Ausführliche Erklärungen.

E. MERZBACHER, *Quantum Mechanics*, 1998.

Sehr ausführlich und umfassend, mit detaillierten Rechnungen. Für eine Einführung zu umfangreich.

C. COHEN-TANNOUDJI, B. DIU, F. LALOE, *Quantenmechanik 1,2*, 1999 (deutsche Ausgabe 2010).

Extrem ausführlich, aber unübersichtlich. Alle Rechnungen komplett.

Zur Interpretation der Quantenmechanik:

Auch hier gibt es zahlreiche Werke, von denen einige wenige erwähnt seien.

- E. SQUIRES, *The Mystery of the Quantum World*, 1994.
Elementar und auf das „Messproblem“ (Kollaps der Wellenfunktion) fokussiert.
- Y. AHARONOV, D. ROHRLICH, *Quantum Paradoxes*, 2005.
Übersicht über die Paradoxien in der Interpretation der Quantenmechanik.
- J. AUDRETSCH, *Verschränkte Systeme*, 2005.
Einführung in die *Quanteninformati~~on~~stheorie*. Mathematikteil. Knappe Besprechung der Grundlagen der QM. Fokus auf nicht-klassische Eigenschaften als Grundlage der Quanteninformati~~on~~stheorie.

Übungsbücher:

- S.FLÜGGE, *Rechenmethoden der Quantentheorie* und *Practical Quantum Mechanics*.
Viele systematisch gegliederte und gelöste Aufgaben. Die beiden Bücher sind zu einem großen Teil gleich. Diverse Ausgaben.
- D.GRAU, *Übungsaufgaben zur Quantentheorie*, 1993.
Weniger systematisch.

Kapitel 1

Wellen und Teilchen

Wie alle Theorien kann man auch die Quantenmechanik nicht herleiten, genausowenig wie etwa die Newtonschen Gesetze. Die Entwicklung einer Theorie erfolgt anhand experimenteller Beobachtungen, oft in einem langen Prozess von Versuch und Irrtum. Dabei sind oft neue Begriffsbildungen nötig. Wenn die Theorie nicht nur die bisherigen Beobachtungen beschreibt, sondern eigene Aussagekraft hat, folgen aus ihr Vorhersagen für weitere Experimente, die überprüfbar sind. Wenn diese Vorhersagen eintreffen, ist die Theorie insoweit bestätigt, aber nicht "bewiesen", denn es könnte immer andere Experimente geben, die nicht richtig vorhergesagt werden. Trifft dagegen auch nur eine Vorhersage der Theorie *nicht* ein, so ist sie falsifiziert. Die in vielen Aspekten zunächst sehr merkwürdige Quantenmechanik hat bisher alle experimentellen Überprüfungen bestens überstanden, im Gegensatz zu einigen vorgeschlagenen Alternativen (z.B. mit „Hidden Variables“).

Wir folgen in dieser Vorlesung nicht der historischen Entwicklung der Quantenmechanik mit ihren Umwegen, sondern behandeln einige Schlüsselexperimente, an denen das Versagen der klassischen Physik besonders klar wird, und die zu den Begriffen der Quantenmechanik führen. Dabei kann, im Sinne des oben Gesagten, die Quantenmechanik nicht „hergeleitet“, sondern nur plausibel gemacht werden.

Die drastischste Beobachtung, die zum Verlassen des klassischen Weltbildes führt, ist, dass alle Materie und alle Strahlung gleichzeitig Teilchencharakter und Wellencharakter hat. Besonders klar wird dies im sogenannten Doppelspaltexperiment. Dabei laufen Teilchen oder Strahlen auf eine Wand mit zwei Spalten zu. Dahinter werden sie auf einem Schirm detektiert.

1.1 Das Doppelspaltexperiment mit klassischen Teilchen

1.1.1 Kugeln

Wir untersuchen, welches Verhalten wir bei Kugeln erwarten, die durch die klassische Newtonsche Mechanik beschrieben werden. (Tatsächliche Kugeln verhalten sich natürlich quantenmechanisch. Die Effekte sind aber wegen ihrer hohen Masse nicht erkennbar).

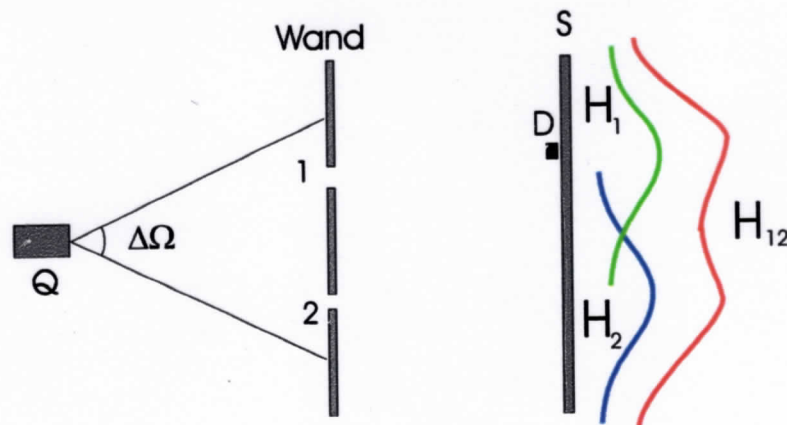


Abbildung 1.1: *Doppelspaltexperiment mit Kugeln. H beschreibt die beobachteten Auftreffhäufigkeiten.*

Wir machen ein Gedankenexperiment mit dem Aufbau, der in Abbildung (1.1) skizziert ist.

- Eine Quelle schießt Kugeln zufällig in den Raumwinkel $\Delta\Omega$.
- Auf dem Schirm S werden die Kugeln registriert. Die Koordinate entlang des Schirms sei x . Aus der Häufigkeit des Auftreffens von Kugeln in einem Intervall $(x, x + \Delta x)$ ergibt sich die Wahrscheinlichkeit $P(x)\Delta x$, dass eine Kugel in diesem Intervall ankommt.
- Die Quelle wird mit so geringer Intensität betrieben, dass die Kugeln einzeln ankommen.

Das Experiment wird nun auf verschiedene Weisen durchgeführt:

- 1) Nur Spalt 1 ist offen: dies liefert die Verteilung $P_1(x)$
- 2) Nur Spalt 2 ist offen: dies liefert die Verteilung $P_2(x)$
- 3) Beide Spalte sind offen: dies liefert $P_{12}(x)$, nämlich einfach die Summe $P_{12}(x) = P_1(x) + P_2(x)$ der vorherigen Verteilungen.

1.1.2 Wasserwellen

Wir wiederholen den Versuch mit Wasserwellen. Die Versuchsanordnung ist in Abbildung (1.2) dargestellt.

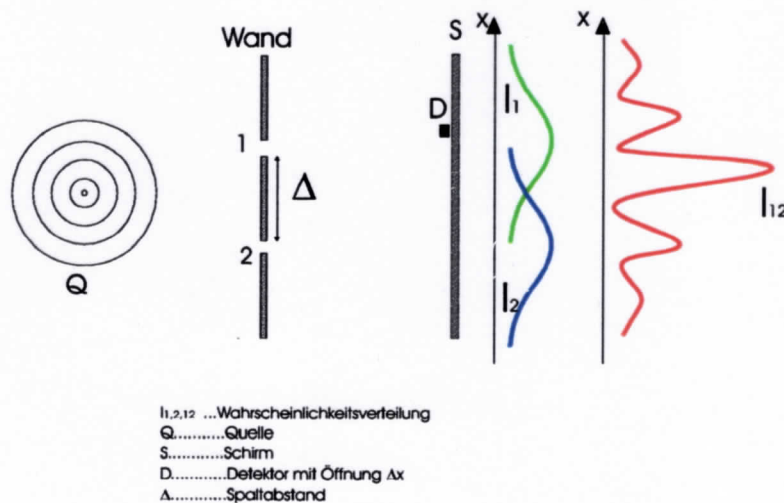


Abbildung 1.2: Doppelspaltexperiment mit Wasserwellen.

- Die Quelle erzeugt kreisförmige Wellen.
- Die Wand hat wieder zwei Spalte.
- Der Schirm S sei ein Absorber, so dass keine Wellen reflektiert werden.
- Wir finden, dass die Auslenkung beim Schirm mit der Zeit oszilliert, mit einer ortsabhängigen *Amplitude*.
- Der Detektor D messe die Intensität $I = |\text{Amplitude}|^2$.

Man beobachtet:

1. Die Intensität I kann alle positiven Werte annehmen (abhängig von der Quelle). Es tritt keine Quantelung auf.
2. Wir lassen nur Spalt 1 oder 2 offen und finden:
Die Intensitäten I_1 bzw. I_2 gleichen den entsprechenden Häufigkeiten beim Experiment mit Kugeln.
3. Wir lassen beide Spalte offen:
 $I_{12}(x)$ zeigt ein Interferenzbild; $I_{12} \neq I_1 + I_2$.
Es hängt vom Abstand Δ der Spalte ab.
Die Interferenz zwischen beiden (Teil)Wellen ist an manchen Stellen konstruktiv und an anderen destruktiv. Konstruktive Interferenz tritt auf, wenn
Abstand (Detektor zu Spalt 1) - Abstand (Detektor zu Spalt 2) = $n \cdot \lambda$,
wobei λ die Wellenlänge ist, und $n \in \mathbb{N}$.
4. Mathematische Beschreibung:
Es ist bequem, zur Beschreibung der zeitlichen Oszillation die Funktion $e^{i\omega t} = \cos \omega t + i \sin \omega t$ zu verwenden, von der hier nur der Realteil benutzt wird.

Die momentane Auslenkung am Ort des Detektors D ist

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \operatorname{Re}(a_1 e^{i\omega t}) && \text{nur Spalt 1 offen} \\
 A_2 &= \operatorname{Re}(a_2 e^{i\omega t}) && \text{nur Spalt 2 offen} \\
 A_{12} &= \operatorname{Re}(a_1 e^{i\omega t} + a_2 e^{i\omega t}) && \text{beide Spalte offen} \\
 a_1, a_2 &\in \mathbb{C}
 \end{aligned}$$

Der Bezug zu den gemessenen Intensitäten ist

$$\begin{aligned}
 I_1 &= |a_1 e^{i\omega t}|^2 && = |a_1|^2 \\
 I_2 &= |a_2 e^{i\omega t}|^2 && = |a_2|^2 \\
 I_{12} &= |a_1 e^{i\omega t} + a_2 e^{i\omega t}|^2 && = |a_1|^2 + |a_2|^2 + [2|a_1||a_2| \cos(\delta)] \\
 &&& = I_1 + I_2 + [2|a_1||a_2| \cos(\delta)]
 \end{aligned}$$

Der Term in der eckigen Klammer ist der Interferenzterm, der von der Phasendifferenz δ abhängt, die sich aus dem Gangunterschied ergibt.

1.2 Licht

Die übliche sehr erfolgreiche Beschreibung von Licht in der makroskopischen Welt ist die einer Welle, mit elektrischen und magnetischen Feldern. Die durch Experimente notwendig gewordene teilchenartige Beschreibung über Photonen war eine Revolution.

Licht besteht aus Photonen

Es seien kurz einige frühe Experimente erwähnt, welche die Teilchennatur von Licht zeigen.

- Die Hohlraumstrahlung, also das temperaturabhängige Spektrum eines schwarzen Körpers, lässt sich klassisch nicht verstehen. Bei einer klassischen Wellennatur des Lichts würde die Intensität des Spektrums zu hohen Frequenzen hin divergieren. Die Energiedichte des elektromagnetischen Feldes wäre unendlich! Die Erklärung für das tatsächlich beobachtete Spektrum fand Planck im Jahr 1900 (am selben Tag, an dem er die genauen experimentellen Ergebnisse erfuhr!), indem er postulierte, dass Licht nur in festen Einheiten der Energie $E = h\nu$ abgestrahlt wird. Die später Photonen genannten „Quanten“ gaben der Quantentheorie ihren Namen. Dieses Postulat war eine „Verzweiflungstat“ Plancks und stieß auf grosse Skepsis. Einstein nannte es „verrückt“.
- Beim Photoeffekt schlägt ein Photon der Frequenz ν aus einem Metall ein Elektron heraus, das mit der kinetischen Energie $h\nu - \Phi$ austritt, wobei Φ eine Austrittsarbeit ist. Es gibt daher eine Schwelle für die Frequenz des Photons, unterhalb derer keine Elektronen austreten. Klassisch hätte man erwartet, dass bei *jeder* Photonfrequenz mit zunehmender Lichtintensität mehr und ~~mehr~~ *schnellere* Elektronen „losgeschüttelt“ würden. Stattdessen bestimmt die Intensität des Lichtes nur die *Anzahl* der austretenden Elektronen und auch nicht ihre kinetische Energie. Mit der Lichtquantenhypothese konnte Einstein 1905 den Photoeffekt erklären. Es war diese Arbeit, für die er 1921 den Nobelpreis erhielt.
- Auch der Comptonereffekt, mit Streuung von Licht an Elektronen, lässt

sich nur über Photonen erklären.

- Noch direkter bemerkt man die Partikelstruktur von Licht mit Geigerzählern, Photomultipliern oder mit CCDs (Digitalkameras!). Interessanterweise kann man sogar mit bloßem Auge bei einer schwach beleuchteten Wand fleckige Helligkeitsschwankungen erkennen, die sich schnell ändern. Sie beruhen auf der Schwankung der Anzahl auftreffender Photonen, die man ab etwa 10 pro 100msec wahrnehmen kann.

Licht hat Wellennatur

Die Wellennatur des Lichtes erkennt man klar am Doppelspaltexperiment: Aufbau und Ergebnis bezüglich der Intensitäten verhalten sich genau wie beim Experiment mit Wasserwellen. In der Maxwelltheorie ist die Intensität des Lichts proportional zum Quadrat der Amplitude des elektrischen Feldes $I \sim \vec{E}^2$, also von derselben Struktur wie bei den Wasserwellen, nur dass jetzt das elektrische und das magnetische Feld die Rolle der Amplitude spielen.

Ganz anders als bei Wasserwellen ist aber das Auftreffen des Lichtes auf den Schirm: die Photonen treffen einzeln auf, jeweils mit der Energie $h\nu$, und erzeugen trotzdem ein Interferenzbild, wenn 2 Spalte geöffnet sind! Der Auftreffpunkt eines einzelnen Photons lässt sich dabei nicht vorhersagen, sondern nur die zugehörige Wahrscheinlichkeitsverteilung!

1.3 Elektronen

Noch etwas deutlicher wird die Problematik von Teilchen- und Wellennatur im Fall von Materie, wie Elektronen oder Atomen. Die „Teilchennatur“ ist hier sehr klar. Zum Beispiel kann man für ein einzelnes Elektron Ladung und Masse bestimmen.

Interferenz von Elektronen

Das Verhalten am Doppelspalt zeigt aber wieder Wellennatur (siehe Abbildung 1.3)! Experimentelle Beobachtungen:

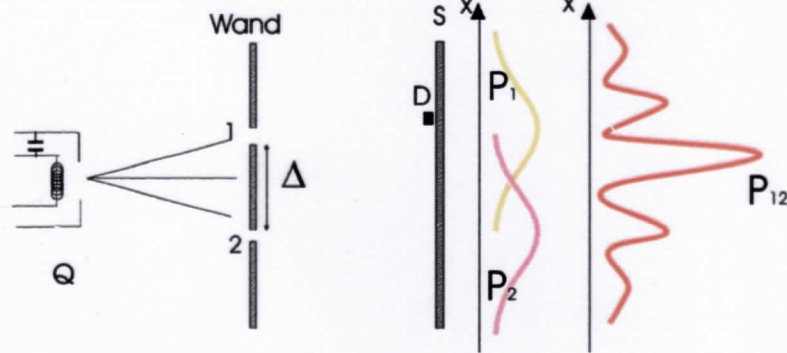


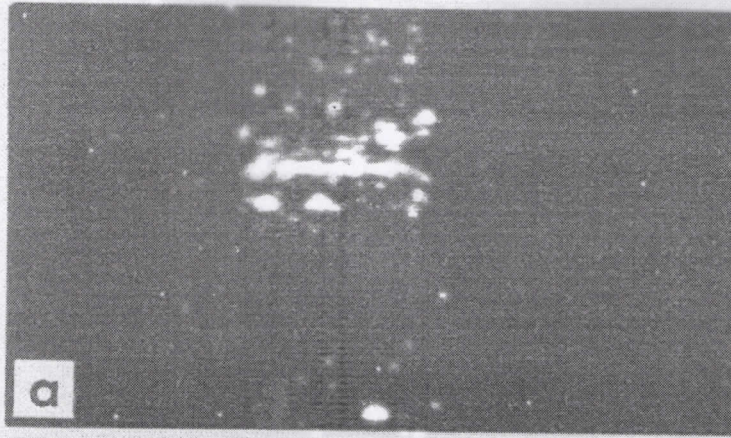
Abbildung 1.3: Doppelspaltexperiment mit Elektronen.

1. Die Elektronen kommen (wie klassische Teilchen) als Einheiten am Detektor an.
2. In Abhängigkeit vom Ort des Detektors variiert die Zählrate.
3. Gemessen wird eine Häufigkeitsverteilung, d.h. die Auftreffwahrscheinlichkeit.
4. Öffnet man nur Spalt 1 oder nur Spalt 2, so tritt eine Häufigkeitsverteilung wie bei Kugeln (oder bei Wellen mit nur 1 offenen Spalt) auf.
5. Öffnet man dagegen beide Spalte, so beobachtet man ein Interferenzmuster, also wieder eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_{12} \neq P_1 + P_2$. Insbesondere *sinkt* durch das Öffnen des 2. Spaltes an manchen Stellen sogar die Auftreffwahrscheinlichkeit auf Null.

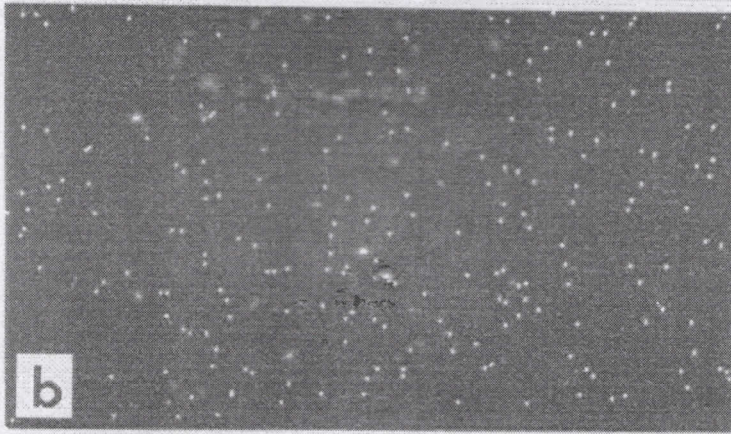
Dasselbe Verhalten hat man auch mit Neutronen, Atomen und sogar Fulleren-Molekülen beobachtet! Die Mathematik zur korrekten Beschreibung des Experiments ist in ihrer Struktur sehr einfach. Wir können, wie bei Wellen, komplexwertige Amplituden, sogenannte „Wahrscheinlichkeitsamplituden“ φ_1 und φ_2 definieren, aus denen wir die Intensität (=Auftrittswahrscheinlichkeit) als Betragsquadrat erhalten

$$\begin{aligned}
 P_1 &= |\varphi_1|^2 \\
 P_2 &= |\varphi_2|^2 \\
 P_{1,2} &= |\varphi_1 + \varphi_2|^2
 \end{aligned}$$

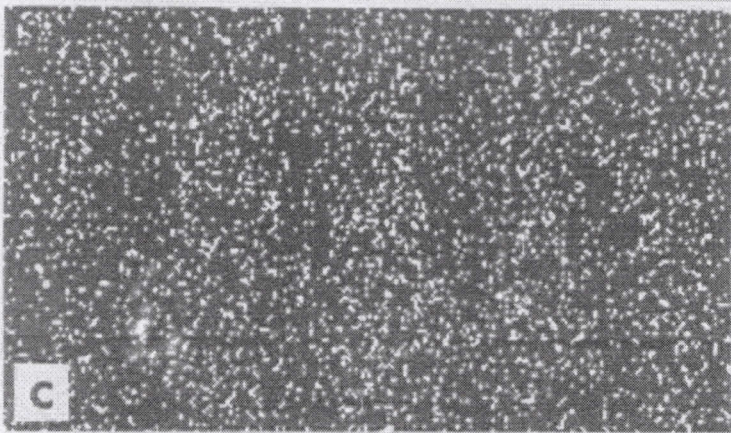
10



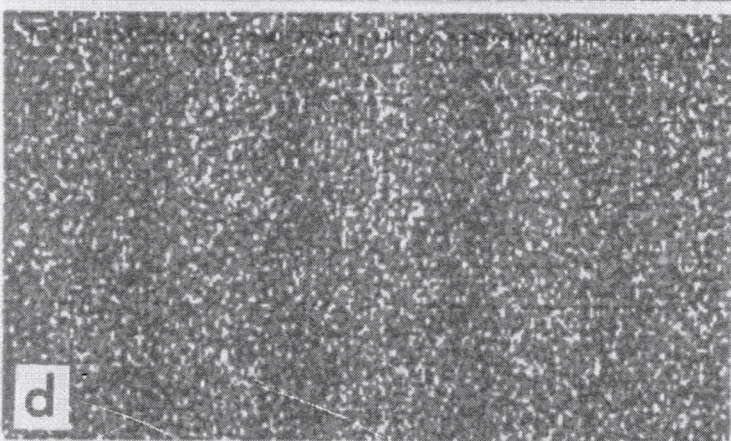
200



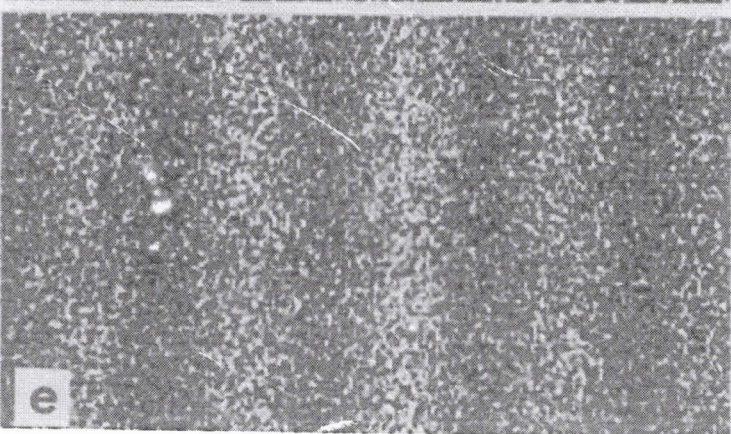
6000



$4 \cdot 10^5$



$1.4 \cdot 10^6$



A. TONUMURA,
HITACHI, 1989

Dies ist analog zu Wellen. Bei klassischen Wellen sind die komplexen Zahlen ein mathematischer Trick zur Vereinfachung, von denen nur der Realteil verwendet wird. Quantenmechanisch stellt sich heraus, dass für die Wahrscheinlichkeitsamplitude komplexe Zahlen verwendet werden müssen.

Man kann die Bahn eines einzelnen Elektrons nicht vorhersagen, sondern nur die Wahrscheinlichkeitsverteilung eines ganzen Ensembles von Elektronen !

1.3.1 de Broglie Wellenlänge

Die relevante Längenskala für freie quantenmechanische Teilchen, sowohl Photonen als auch Elektronen (!), ist die

<u>DE-BROGLIE-WELLENLÄNGE</u>	
$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}$	(1.1)

Für nichtrelativistische Elektronen ist der Impuls durch $p^2/2m = E_{kin}$ gegeben, allgemein durch $p = mv/\sqrt{1-v^2/c^2} = \sqrt{E_{tot}^2 - m^2 c^4}$. Auch Photonen besitzen einen im Experiment messbaren Impuls der Größe $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$.
nur wenn m nicht Null gilt immer mal c^4

Diese Längenskala λ erscheint sowohl im Doppelspaltexperiment, als auch z.B. bei der Streuung von Teilchen mit Impuls p an einem Kristall. Man erhält dort ein Interferenzbild (Davisson-Germer-Experiment), und zwar für Elektronen mit Impuls p dasselbe wie für Photonen mit demselben Impuls!

Wie wir in Kap. 4.5 sehen werden, werden freie Elektronen quantenmechanisch durch eine Wahrscheinlichkeitsamplitude in der Form einer ebenen Welle e^{ipx} beschrieben.

Quantenmechanische Effekte werden unterhalb einer Längenskala der Größenordnung der de-Broglie-Wellenlänge λ wichtig. Sie beträgt zum Beispiel bei

$$\begin{aligned}
 \text{Protonen: } \lambda &\simeq \frac{0.28 \text{ \AA}}{\sqrt{E_{kin}/\text{eV}}} \\
 \text{Elektronen: } \lambda &\simeq \frac{12 \text{ \AA}}{\sqrt{E_{kin}/\text{eV}}} \\
 \text{Photonen: } \lambda &\simeq \frac{12400 \text{ \AA}}{E/\text{eV}} \quad (E = E_{kin})
 \end{aligned}
 \tag{1.2}$$

Zu freien Photonen wie zu freien Materieteilchen gehört auch eine, zuerst ebenfalls von de Broglie postulierte, charakteristische Frequenz ν mit

$$\boxed{E_{kin} = h\nu = \hbar\omega}
 \tag{1.3}$$

Mehr dazu im Kapitel 4.

Eine andere fundamentale Länge ist die Compton-Wellenlänge

$$\lambda^C = \frac{h}{mc}
 \tag{1.4}$$

Sie hängt nicht vom Impuls ab. Sie ist gleich der de-Broglie Wellenlänge eines massiven Teilchens mit Impuls $p = mc$. Anders gesagt: Ein Photon mit der Wellenlänge λ^C hat dieselbe Energie wie ein ruhendes Teilchen der Masse m . Für ein Elektron beträgt die Compton-Wellenlänge 0.024 \AA . Diese Wellenlänge ist bei der Compton-Streuung und in der relativistischen Quantenfeldtheorie relevant.

1.3.2 Experiment zur Bestimmung der Trajektorie

Da die Elektronen im Doppelspaltexperiment einzeln am Detektor eintreffen, kann man vermuten, dass jedes Elektron nur entweder durch Spalt 1 oder durch Spalt 2 geht. Wir wiederholen daher das Doppelspaltexperiment mit zwei geöffneten Spalten. Gleichzeitig zum Signal, das wir am Schirm messen, wollen wir versuchen festzustellen, durch welchen Spalt das Elektron geht. Zu diesem Zweck platzieren wir hinter dem Doppel-

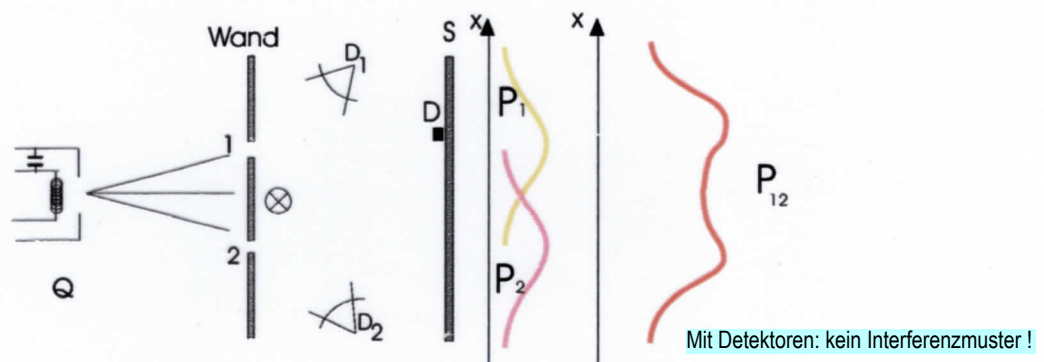


Abbildung 1.4: Experiment zur Bestimmung der Trajektorie.

spalt eine Lichtquelle, wie in Abbildung 1.4. Wenn ein Elektron durch einen der Spalte fliegt, entsteht durch Streuung von Photonen am Elektron im zugehörigen Detektor ein Lichtblitz. Man kann also aus dem jeweiligen Lichtblitz folgern, durch welchen Spalt das Elektron geflogen ist.

Wenn man das Experiment durchführt, beobachtet man, dass es mit jedem auf dem Schirm nachgewiesenen Elektron nur einen Lichtblitz gibt, entweder von Spalt 1 oder von Spalt 2. Wenn wir allerdings die ortsauflöste Auftreffrate analysieren, finden wir nun

$$P_{12} \simeq P_1 + P_2 ,$$

wobei P_1, P_2 die Wahrscheinlichkeiten des Einfachspalt-Experimentes sind; d.h. die Interferenz ist durch Einschalten der Lichtquelle (fast) verschwunden! Schalten wir das Licht wieder aus, ist die Interferenz wieder da.

Offensichtlich hat die Elektron-Licht-Wechselwirkung die Elektronen drastisch gestört!

Man könnte daran denken, die Lichtintensität zu reduzieren. Dabei zeigt sich jedoch, dass nun nicht mehr gleichzeitig zu jedem Detektorsignal ein Lichtblitz auftritt. Dies liegt daran, dass zu wenige Photonen aus der Lichtquelle austreten. Wenn wir die Fälle untersuchen, bei denen ein Lichtblitz aufgetreten ist, erhalten wir nach wie vor keine Interferenz. Umgekehrt zeigt die Auftrefferate derjenigen Elektronen, bei deren Durchgang kein Lichtblitz registriert wurde, wieder ein Interferenzbild.

Es gibt aber noch eine andere Möglichkeit, den Einfluss der Photonen auf die Elektronen zu reduzieren. Das Elektron wird in unserem Versuch detektiert, indem zumindest 1 Photon am Elektron gestreut wird, wodurch gleichzeitig die Bahn des Elektrons gestört wird. Die Impulsänderung des Elektrons hängt vom Impuls des Photons ab. Zwischen dem Impuls p und der Wellenlänge λ besteht die Beziehung $p = h/\lambda$. Um den Impuls des Photons und somit den Impulsübertrag auf das Elektron zu reduzieren, muss die Wellenlänge des Lichtes vergrößert werden. Wenn wir das tun, beobachten wir, dass oberhalb einer charakteristischen Wellenlänge das Interferenzbild wieder auftaucht. Die charakteristische Wellenlänge entspricht dem Abstand der Spalte, ist also gerade so groß, dass wir nun nicht mehr genau sagen können, durch welchen Spalt das Elektron gegangen ist !

1.4 Folgerungen

Die beschriebenen Experimente legen eine Reihe von Schlussfolgerungen nahe. Die allgemeine Gültigkeit dieser Folgerungen zeigt sich durch die dargestellten und viele andere Experimente und deren theoretische Beschreibung.

Die Teilchen kommen im Doppelspaltexperiment anscheinend an zufälligen Orten an. Tatsächlich zeigt es sich, dass der Auftreffort eines *einzelnen* Teilchens nicht vorhergesagt werden kann. Allgemein gilt

- Deterministische Aussagen über das Verhalten einzelner Teilchen sind in der Regel nicht möglich. Berechnen kann man nur Wahrscheinlichkeiten für ein Ensemble von gleichartig präparierten Teilchen. Diese Wahrscheinlichkeiten sind wohldeterminiert.
- Elektronen und Photonen kommen einzeln als Teilchen an. Ihre Auftreff-Wahrscheinlichkeit ist wie die Intensität von Wellen verteilt.
- Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Experiment einen bestimmten Ausgang nimmt, ist durch das Betragsquadrat einer komplexen Zahl φ , der „Wahrscheinlichkeitsamplitude“ gegeben.

$$P = |\varphi|^2 \quad (1.5)$$

- Wenn ein Ereignis auf verschiedenen Wegen i erreicht werden kann, sind die Wahrscheinlichkeitsamplituden für die Einzelereignisse aufzusummieren (wie die Amplituden bei Wellen)

$$\varphi = \sum_{i=1}^m \varphi_i \quad (1.6)$$

Hierdurch tritt Interferenz auf.

Bei makroskopischer Physik sind Interferenzterme in der Regel so winzig, dass sie nicht mehr beobachtbar sind. Dadurch wird die makroskopische Physik „klassisch“.

+ "Dekohärenz",
siehe letztes Kapitel

Wellen- und Teilcheneigenschaften werden in der Quantenmechanik mit Hilfe der „Wahrscheinlichkeitsamplitude“ beschrieben. Elektronen und Photonen sind weder klassische Teilchen noch klassische Wellen.