

1 Physikalische Hintergründe: Teilchen oder Welle?

1.1 Geschichtliches: Warum Quantenmechanik?

- Bis ~ 1900 : “klassische Physik” Newtonsche Mechanik, Maxwellsche Elektrodynamik.
- 1905: Erweiterung der klassischen Mechanik durch die Relativitätstheorie Einsteins.

Die klassische Theorie umfasst die Beschreibung von “Massenpunkten” mit Ort $\mathbf{r}(t)$ und Impuls $\mathbf{p}(t)$, und von elektrischen und magnetischen Feldern $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$.

- Klassische Teilchen können beliebig lokalisiert sein; Die Kräfte, die auf die Teilchen einwirken, werden von den Feldern $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ und $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ durch die Lorentz-Kraft bestimmt.
- Die Felder $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ sind räumlich ausgedehnt. Es gibt Felder, die ganz durch die Anwesenheit von Teilchen bestimmt werden (das Coulombfeld eines Ladungspunktes), und es gibt Felder, die eine unabhängige Lösung der Maxwellgleichungen darstellen (elektromagnetische Wellen).

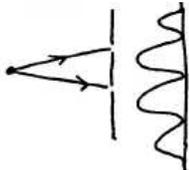
1.2 Elektromagnetische Felder (Strahlung)

Am Anfang des 20. Jahrhundert gab es starke experimentelle Hinweise, dass elektromagnetische Felder nicht nur Wellen-Eigenschaften besitzen, sondern auch Eigenschaften, die man mit Teilchen verbindet. Diese Eigenschaften konnten nicht mit der Maxwellsche Theorie erklärt werden.

Welle

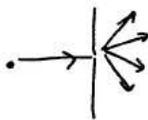
Teilchen

- Interferenz



Intensität

- Beugung



- Hohlraumstrahlung:

Elektromagnetische Strahlung im thermodynamischen Gleichgewicht bei der Temperatur T .



Das Rayleigh-Jeans Gesetz aus der klassischen statistischen Physik gibt die Energie $u(\omega)d\omega$ pro Volumeneinheit im Frequenz-Intervall $[\omega, \omega + d\omega]$,

$$u(\omega) = \frac{k_B T}{\pi^2 c^3} \omega^2.$$

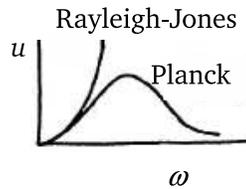
Experimentell findet man aber eine andere Energiedichte $u(\omega)$, die von dem Planckschen Gesetz beschrieben wird:

$$u(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/kT} - 1},$$

wobei

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.0546 \cdot 10^{-27} \text{ erg s}$$

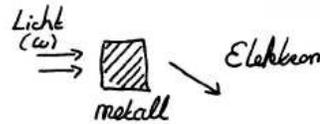
eine "neue" Naturkonstante ist.



Das Plancksche Gesetz wird begründet durch die Hypothese, dass die elektromagnetische Strahlung nur in den Energiequanten $\hbar\omega$ auftritt.

- Photoelektrischer Effekt:

Elektronen können unter der Wirkung elektromagnetischer Strahlung aus einem Metall austreten.



Experimentell wurde festgestellt, dass die kinetische Energie der ausgetretenen Elektronen der Gleichung

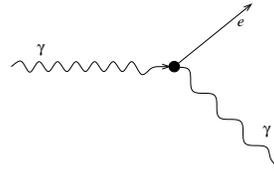
$$K = \hbar\omega - W$$

genügt, wobei W eine “Austrittsarbeit” ist, die unabhängig von der Frequenz ω der elektromagnetischen Strahlung ist. (Die Austrittsarbeit ist die Energie, die benötigt wird, um die Elektronen aus dem Hintergrund der positiv geladenen Ionen zu befreien.) Der Austritt der Elektronen findet schon bei beliebig kleiner Intensität der Strahlung statt, aber nur wenn die Frequenz hoch genug ist, $\hbar\omega > W$. Der Austritt findet ohne zeitliche Verzögerung statt, d.h., sofort nachdem das Metall der Strahlung ausgesetzt wird. Es findet kein Austritt statt, wenn $\hbar\omega < W$, auch nicht bei hoher Intensität.

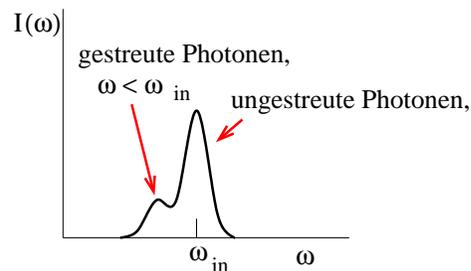
Erklärung (Einstein, 1905): Licht besteht aus “Photonen”, Teilchen mit Energie $\hbar\omega$, Impuls $\hbar k$, und ohne Masse.

Bemerkung: Dass der Impuls der Photonen $\hbar k$ ist, folgt aus der relativistischen Energie-Impuls Relation, $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$. Da die Photonen die Geschwindigkeit c haben, $c = dE/dp = pc/\sqrt{p^2 + m^2 c^2}$, folgt $m = 0$ und $p = E/c$.

- Compton-Effekt, 1925



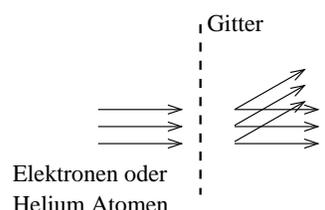
Elektromagnetische Strahlung (d.h., Photonen) stösst auf auf Materie (d.h., Elektronen) und "ändert dabei ihre Frequenz. Da das Elektron vor dem Zusammenstoß eine kleine (vernachlässigbare) kinetische Energie hat, und nach dem Zusammenstoß eine endliche (größere) kinetische Energie hat: Energieerhaltung \Rightarrow Photonenenergie nimmt ab \Rightarrow Frequenz nimmt ab. Deshalb haben die gestreuten Photonen eine niedrigere Frequenz ω als die ungestreuten Photonen.



Wichtige Schlussfolgerung: Dualität: Licht besitzt sowohl Welleneigenschaften als auch Teilcheneigenschaften.

1.3 Materie

Zur gleichen Zeit, gab es auch starke Hinweise, dass Materie nicht nur ein Teilchencharakter, sondern auch ein Wellencharakter hat.

Welle	Teilchen
<ul style="list-style-type: none"> • <u>Interferenz</u>  <p>Interferenzexperimente konnten nicht nur mit Strahlung, sondern auch mit Teilchen durchgeführt werden. Die beobachteten Interferenzmuster sind konsistent mit Interferenz von Wellen mit</p> $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$ <p>Schon vor den ersten Experimenten (1923), hat de Broglie die Hypothese aufgestellt, dass Teilchen durch Wellen mit Frequenz und Wellenvektor</p> $\omega = \frac{K}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$ <p>beschrieben werden. Die physikalische Bedeutung der Welle war damals noch nicht bekannt.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • <u>Ionisationsspuren</u> in der <u>Wilson-Kammer</u> treten nur entlang der Flugbahn auf. • <u>Streu/Stoßexperimente</u>. • <u>Millikan-Versuch</u>: Ladung ist quantisiert in Einheiten e. • <u>Struktur des Festkörpers</u>: Gitter usw. • Die Erfolge der kinetischen Gastheorie und der statistischen Thermodynamik bei der Beschreibung von Gasen.

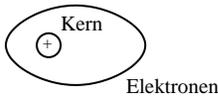
Wichtige Schlussfolgerung: Dualität: Materie besitzt sowohl Welleneigenschaften als auch Teilcheneigenschaften.

1.4 Diskrete Zustände

Ausserdem gab es starke Hinweise, dass bestimmte Grössen in der Natur diskret sind, statt kontinuierlich. Ein Beispiel ist die Plancksche Hypothese, dass die Energie eines Strahlungsfeldes nur in Einheiten von $\hbar\omega$ auftritt. Wir besprechen nun zwei weitere Beispiele diskreter Zustände, die sich mit der klassischen Theorie nicht erklären lassen.

1. Strahlung von Atomen.

- “Alte” Theorie: Rutherford’sches Atom-Modell



Probleme:

- Elektronenbewegung ist beschleunigt auf einer elliptischen Bahn \Rightarrow Energie wird abgestrahlt (laut Maxwell Theorie), Elektron fällt spiralförmig in den Kern.
- Umlauffrequenz kann kontinuierlich variieren \Rightarrow Frequenz der Strahlung ist eine kontinuierliche Grösse.

- Experiment:

- Atome sind stabil;
- Es tritt nur Strahlung mit diskreten Frequenzen auf. Für Wasserstoff werden diese Frequenzen (zunächst empirisch) durch die Gleichung

$$\hbar\omega = \text{Ry} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right),$$

beschrieben, wo $n < m$ ganzzahlig sind und $\text{Ry} \approx 13.6\text{eV}$.

Vorläufige Lösung: Bohrsches Atom-Modell (1913). In diesem Atommodell sind nur klassische Elektronenbahnen erlaubt, die der Bedingung

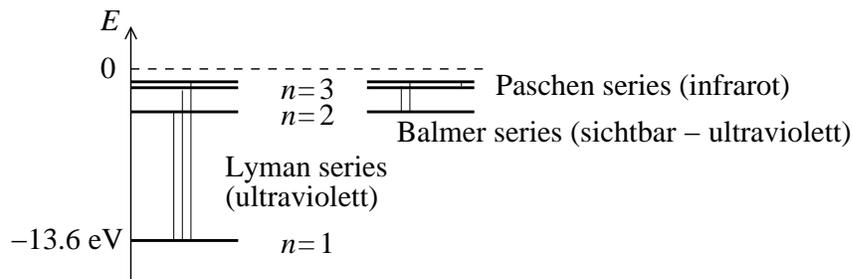
$$\oint \mathbf{p} d\mathbf{r} = 2\pi\hbar n$$

genügen. Dies führt zu einer Quantisierung der Elektron-Energie,

$$E_n = -\frac{\text{Ry}}{n^2}, \quad \text{Ry} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13.6\text{eV}.$$

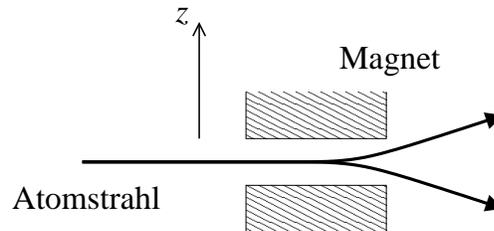
Die Frequenzen der auftretenden Strahlung sind dann

$$\hbar\omega = E_m - E_n.$$



Probleme mit dem Borschen Atommodell: Es ist “ad-hoc” und kann nicht auf beliebige weitere Elemente verallgemeinert werden.

2. Stern-Gerlach-Experiment:



Ein Strahl paramagnetischer Atome, mit magnetischem Dipolmoment μ pro Atom, läuft durch ein räumlich inhomogenes Magnetfeld $\mathbf{B}(\mathbf{r})$.

Die magnetische Energie eines Atomes mit Dipolmoment $\boldsymbol{\mu}$ in einem Magnetfeld \mathbf{B} ist $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Deshalb gibt es in einem inhomogenen Magnetfeld eine Kraft,

$$\mathbf{F} = \nabla (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \mathbf{e}_z.$$

Wenn die Atomen aus einer nicht-polarisierten Quelle kommen, ist ihr Dipolmoment $\boldsymbol{\mu}$ willkürlich orientiert. Dann: μ_z variiert kontinuierlich \Rightarrow Man erwartet eine breite Auffächerung des Atomstrahls.

In Wirklichkeit: nur diskrete Strahlen $\Rightarrow \mu_z$ muss quantisiert sein. Weil μ proportional ist zum Drehimpuls: Quantisierung des Drehimpulses.

1.5 Quantentheorien

Ziel der Quantentheorie ist eine konsistente Beschreibung von Teilchen- und Welleneigenschaften und diskreten Zuständen.

- 1925, 1926 Quantentheorie für nicht-relativistische Materie (Schrödinger, Heisenberg),
- 1928 Quantentheorie für relativistische Elektronen (Dirac),
- 1927 Quantentheorie für Strahlung (Dirac).

Diese Vorlesung befasst sich ausschliesslich mit der nicht-relativistischen Quantentheorie für (nur) ein Teilchen. Die Erweiterung der Theorie auf mehrere Teilchen, Strahlung und ein relativistisches Teilchen ist Gegenstand der Vorlesung “advanced quantum mechanics”.

1.6 Synopsis der klassischen Mechanik

Wir werden uns auf den Hamilton-Formalismus beziehen.

In dem Hamilton Formalismus wird ein Teilchen durch (generalisierte) Koordinaten q_1, \dots, q_d (d : dimension) und (kanonische) Impulse p_1, \dots, p_d beschrieben. Die Energie

$$H = H(q_1, \dots, q_d, p_1, \dots, p_d)$$

wird Hamilton-Funktion genannt. Aus der Hamilton-Funktion gehen die Hamilton-Jacobi-Gleichungen hervor, die “Bewegungsgleichungen” der Koordinaten q_j and Impulse p_j ,

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \quad j = 1, \dots, d.$$

Wir werden uns hauptsächlich mit einem Massenpunkt in einem Potential $V(\mathbf{r})$ beschäftigen. Für dieses System ist die Hamilton-Funktion gegeben durch

$$H = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} + V(\mathbf{q}),$$

wobei \mathbf{p} und \mathbf{q} d -dimensionalen Vektoren sind.

Die Quantenmechanik wird auf dem Hamilton-Formalismus der klassischen Mechanik aufgebaut.