2. Materiewellen

Für Lichtquanten (Photonen) haben wir

$$E = h\nu = \hbar\omega \qquad \text{mit} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

und deren Impuls

$$p = \frac{E}{c} = h\frac{\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

mit Wellenlänge λ und Wellenzahl $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

de Broglie (Dissertation 1924, Nobelpreis 1929)

Materieteilchen haben Welleneigenschaften.

Teilchen mit Impuls/Energie $\vec{p}/E$ sind ebene Wellen mit $\vec{k}/\omega$ zugeordnet

de-Broglie Beziehungen

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad \text{und} \qquad E = \hbar\omega$$

insbesondere de-Broglie Wellenlänge $p = \frac{h}{\lambda}$

Beispiele

1) klassische Objekte sind makroskopisch

$$p \sim \mathcal{O}\left(\text{kg}\,\tfrac{\text{m}}{\text{s}}\right)$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{6{,}626 \cdot 10^{-34}\,\text{Js}}{1\,\text{kg}\,\frac{\text{m}}{\text{s}}} \sim 10^{-34}\,\text{m}$$

nicht messbar!

$\lll$ Atom $\sim 10^{-10}$ m
Kern $\sim 10^{-14}$ m
Nukleon $\sim 10^{-15}$ m

Klassische Mechanik: Wellenlänge $\lll$ typische Längenskala

2) mikroskopische Objekte

z.B. Elektron mit $v = 0,1\,c$

$$p = m_e v = \frac{511\,\text{keV}}{c^2} \cdot 0,1c \approx 50\,\frac{\text{keV}}{c}$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}\,\frac{c}{c} \approx \frac{6,3 \cdot 197\,\text{MeV} \cdot 10^{-15}\,\text{m}}{50\,\text{keV}}$$

(mit $\hbar c = 197\,\text{MeV}\,\underset{10^{-15}\,\text{m}}{\underset{\shortparallel}{\text{fm}}}$)

$$\Rightarrow \lambda \approx 0{,}25 \cdot 10^{-10}\,\text{m} = 0.25\,\text{Å}$$

Wellenlänge des Elektrons ~ Größe eines Atoms

QM wenn Wellenlänge ~ typische Längenskala

Weitere Experimente zur Wellennatur von Teilchen:
(über Doppelspaltexp. hinaus)

- Elektronenstreuung an Kristallen
  Davison, Germer (1927)
- Beugung mit thermischen Neutronenstrahlen
- Beugungserscheinung mit Atom- und Molekülen

Freie Teilchen

z.B. Elektronenstrahl

de Broglie $E = \hbar\omega$ und $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

aber für freie Teilchen auch $E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$

$\Rightarrow$ Dispersionsrelation $\omega = \frac{\hbar\vec{k}^2}{2m}$

(quadratisch für nichtrel. Teilchen
vgl. zu $\omega = c \cdot k$ für masselose Photonen/Licht)

Wellenfkt.: Materiewellen als ebene Wellen

$$\Psi(\vec{r},t) = A\, e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)}$$

Wellenfronten $\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t = \text{const.}$
stehen senkrecht auf $\vec{k}$ und bewegen sich in $\vec{k}$-Richtung als Fkt. der Zeit

physikalisch messbar ist

Gruppengeschwindigkeit

$$v_G = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}$$

und nicht die Phasengeschwindigkeit $v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}$
für Materiewellen mit nichtrel. Dispersion

$$v_G = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = v$$ → Welle bewegt sich mit klassischer Geschwindigkeit

(siehe Münster, S.5, dass $v_G = v$ auch für rel. Teilchen)

aber $v_p = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2}v$

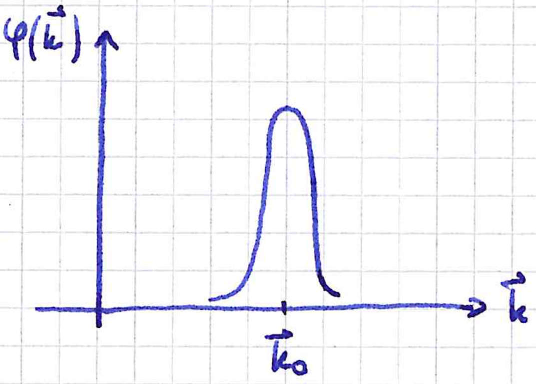
Wellenpaket

ist Überlagerung ebener Wellen

$$\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \varphi(\vec{k})\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

mit $\omega = \frac{\hbar \vec{k}^2}{2m}$ und Impulsverteilung $\varphi(\vec{k})$

Betrachte scharfe Impulsverteilung um $\vec{k}_0$



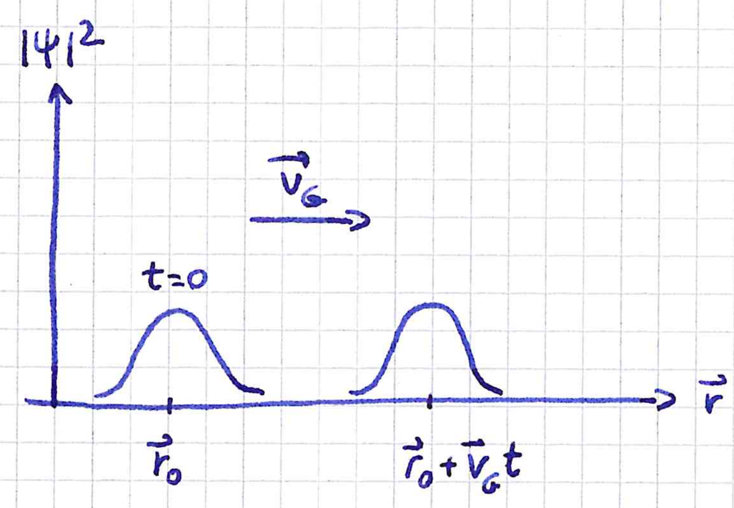
Entwickle $\omega(\vec{k}) = \underbrace{\omega(\vec{k}_0)}_{\omega_0 = \frac{\hbar}{2m}\vec{k}_0^2} + \underbrace{\vec{v}_G}_{\left.\frac{\partial\omega}{\partial\vec{k}}\right|_{\vec{k}_0} = \frac{\hbar\vec{k}_0}{m}} \cdot (\vec{k}-\vec{k}_0) + \dots$

$$\Rightarrow \psi(\vec{r},t) \approx e^{i(\underbrace{\vec{k}_0\vec{v}_G t}_{2\omega_0 t} - \omega_0 t)} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \vec{k}\cdot\vec{v}_G t)}\, \varphi(\vec{k})$$

$$= e^{i\omega_0 t}\, \psi(\vec{r} - \vec{v}_G t, 0)$$

→ Wellenpaket bewegt sich ohne Formänderung mit Geschwindigkeit $\vec{v}_G = \frac{\hbar\vec{k}_0}{m} = \vec{v}_0$

(zu $\vec{k}_0$ gehörenden Teilchengeschwindigkeit)



im allg. zerfließen Wellenpakete, s. Übungsblatt 2

Wellengleichung

für ebene Welle / freie Teilchen gilt

$$\psi(\vec{r},t) = A\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = -i \underbrace{\frac{\hbar}{2m}\vec{k}^2}_{\omega} \psi(\vec{r},t)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial \vec{r}}\psi(\vec{r},t) = i\vec{k}\,\psi(\vec{r},t)$$

$$\Delta\psi(\vec{r},t) = -\vec{k}^2\,\psi(\vec{r},t)$$

$\Rightarrow$ ebene Wellen und Wellenpakete (Überlagerung ebener Wellen) genügen Wellengl. $\rightarrow$ Schrödingergl. für freie Teilchen

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

DGL ist 1. Ordnung in t, d.h. festgelegt durch $\psi(\vec{r}, t=0)$
Anfangsbed.

Allg. Lösung ist ein Wellenpaket.

Wellengl. entspricht Beziehung zwischen

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

Korrespondenz $\updownarrow \quad \updownarrow$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \qquad -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

Erwartungswert

Aufgrund der Wahrscheinlichkeitsinterpretation von $\Psi(\vec{r},t)$ können wir Erwartungswert für den Ort wie folgt bestimmen

$$\boxed{\langle \vec{r}(t) \rangle_{(t)} = \int d^3r \, \underbrace{|\Psi(\vec{r},t)|^2}_{\text{Ws-dichte}} \vec{r} = \int d^3r \, \Psi^*(\vec{r},t) \, \vec{r} \, \Psi(\vec{r},t)}$$

oder

$$\langle \vec{r}(t)^2 \rangle_{(t)} = \int d^3r \, |\Psi(\vec{r},t)|^2 \, \vec{r}^2$$

allg. $\langle f(\vec{r}) \rangle = \quad .. \quad .. \quad f(\vec{r})$

$\langle .. \rangle$ gibt Mittelwert bei wiederholter Messung

Welle-Teilchen Dualismus

Ein Teilchen (z.B. Elektron) ist weder Welle noch Teilchen, sondern ein physikalisches Objekt, welches Wellen- als auch Teilcheneigenschaften zeigen kann. In welcher Weise hängt von expt. Situation ab, z.B. ist Ort des Teilchens nicht definiert, wenn keine Ortsmessung durchgeführt wird. (s. auch Diskussion von Doppelspalt-Experiment)

Wie bestimmen wir den Erwartungswert des Impulses?

→ Impulsraum

Betrachte Wellenpaket in einer Dimension

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi}\, \varphi(k)\, e^{i(kx-\omega t)}$$

$\Rightarrow$ $\dfrac{|\varphi(k)|^2}{2\pi}$ = Ws-dichte für Wellenzahlen k bzw. Impulse $p=\hbar k$

Normierung ($\rightarrow \varphi(k)\overset{e^{-i\omega t}}{\vee}$ ist Fourier Transformierte von $\psi(x,t)$)

s. Parseval Glg.

$$\int dx\, |\psi(x,t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dk\, \underbrace{\frac{|\varphi(k)|^2}{2\pi}} = 1$$

d.h. korrekt normierte Ws-dichte

d.h. für Wellenfkt im Ortsraum

$$\psi(\vec{r},t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\, \tilde{\varphi}(\vec{k},t)\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

ist Fourier-Trafo = Wellenfkt. im Impulsraum

$$\tilde{\varphi}(\vec{k},t) = \int d^3\vec{r}\, \psi(\vec{r},t)\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

$\Rightarrow$ für Wellenpaket (für freie Teilchen)

$$\tilde{\varphi}(\vec{k},t) = \varphi(\vec{k})\, e^{-i\omega(\vec{k})t}$$

Impulsoperator und Ortsoperator

Aus Ws-dichte für Impuls folgt

$$\boxed{\langle \vec{p} \rangle (t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \, |\tilde{\Psi}(\vec{k},t)|^2 \, \hbar \vec{k}} \quad = \langle \hat{\vec{p}} \rangle$$

Übergang zu Ortsraum mit Parseval Glg. (allg. Form)

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{f}^*(\vec{k}) \, \tilde{g}(\vec{k}) = \int d^3r \, f^*(\vec{r}) \, g(\vec{r})$$

mit $\tilde{f}^*(\vec{k}) = \tilde{\Psi}^*(\vec{k},t)$ d.h. $f^*(\vec{r}) = \Psi^*(\vec{r},t)$

und $\tilde{g}(\vec{k}) = \hbar \vec{k} \, \tilde{\Psi}(\vec{k},t)$

$$\Rightarrow \quad g(\vec{r}) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar \vec{k} \, \tilde{\Psi}(\vec{k},t) \, e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{\Psi}(\vec{k},t) \, e^{i\vec{k}\vec{r}}$$

$$= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi(\vec{r},t)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\langle \vec{p} \rangle (t) = \int d^3r \, \Psi^*(\vec{r},t) \, \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \, \Psi(\vec{r},t)} \quad = \langle \hat{\vec{p}} \rangle$$

mit <u>Impulsoperator $\hat{\vec{p}}$</u> (Hut für Operator)

im Ortsraum	$\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$
im Impulsraum	$\hat{\vec{p}} = \hbar \vec{k}$

und Wirkung des Impulsoperators auf Wellenfkt

$$\hat{\vec{P}}\,\psi(\vec{r},t) = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\,\psi(\vec{r},t)$$

$$\hat{\vec{P}}\,\tilde{\psi}(\vec{k},t) = \hbar\vec{k}\,\tilde{\psi}(\vec{k},t)$$

und Erwartungswert

$$\langle\hat{\vec{P}}\rangle = \int d^3r\,\psi^*(\vec{r},t)\,\hat{\vec{P}}\,\psi(\vec{r},t)$$

$$= \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\tilde{\psi}^*(\vec{k},t)\,\hat{\vec{P}}\,\psi(\vec{k},t)$$

Entsprechend ist <u>Ortsoperator $\hat{\vec{Q}}$</u> (benutze Parseval Glg. in andere Richtung)

$$\boxed{\begin{array}{ll} \text{im Ortsraum} & \hat{\vec{Q}} = \vec{r} \\ \text{im Impulsraum} & \hat{\vec{Q}} = -\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\vec{k}} \end{array}}$$

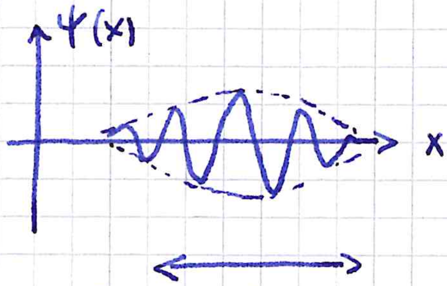
mit Wirkung auf Wellenfkt.

$$\hat{\vec{Q}}\,\psi(\vec{r},t) = \vec{r}\,\psi(\vec{r},t)$$

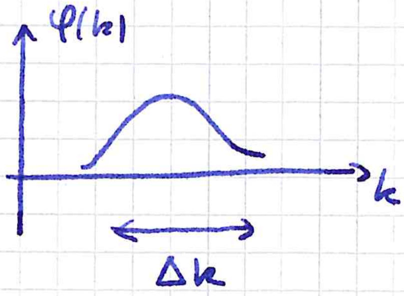
$$\hat{\vec{Q}}\,\tilde{\psi}(\vec{k},t) = -\frac{1}{i}\nabla_{\vec{k}}\,\tilde{\psi}(\vec{k},t)$$

Heisenberg'sche Unschärferelation

Betrachte Wellenpaket



$\leftrightarrow$



mit Breite Δx

Breiten sind gegeben durch Varianz/Schwankung

$$(\Delta x)^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

$$(\Delta k)^2 = \langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2$$

Für das Gauß'sche Wellenpaket hatten wir gesehen:
s. Übung

$$|\Psi(x,0)|^2 \sim e^{-\frac{x^2}{2d^2}} \quad \rightarrow \quad \Delta x = d$$

$$|\tilde{\Psi}(k,0)|^2 \sim e^{-2d^2(k-k_0)^2} \quad \rightarrow \quad \Delta k = \frac{1}{2d}$$

$$\text{oder } \Delta p = \frac{\hbar}{2d}$$

d.h. falls scharf lokalisiert im Ortsraum (kleines d), ist Impulsverteilung sehr breit, und umgekehrt

$\Rightarrow$ für Gauß'sches Wellenpaket gilt $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}$

Für allg. Wellenfkten gilt

$$\boxed{\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Heisenberg'sche Unschärferelation

Ort und Impuls sind nicht simultan scharf meßbar
(zur gleichen Zeit)

in 3 Dimensionen gilt außerdem

$$\Delta y \, \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{und} \quad \Delta z \, \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

Beweis für bel. Wellenfkten folgt später aus Operatoridentität für $\hat{\vec{P}}$ und $\hat{\vec{Q}}$.