

2 Wellenfunktion und Unschärferelation

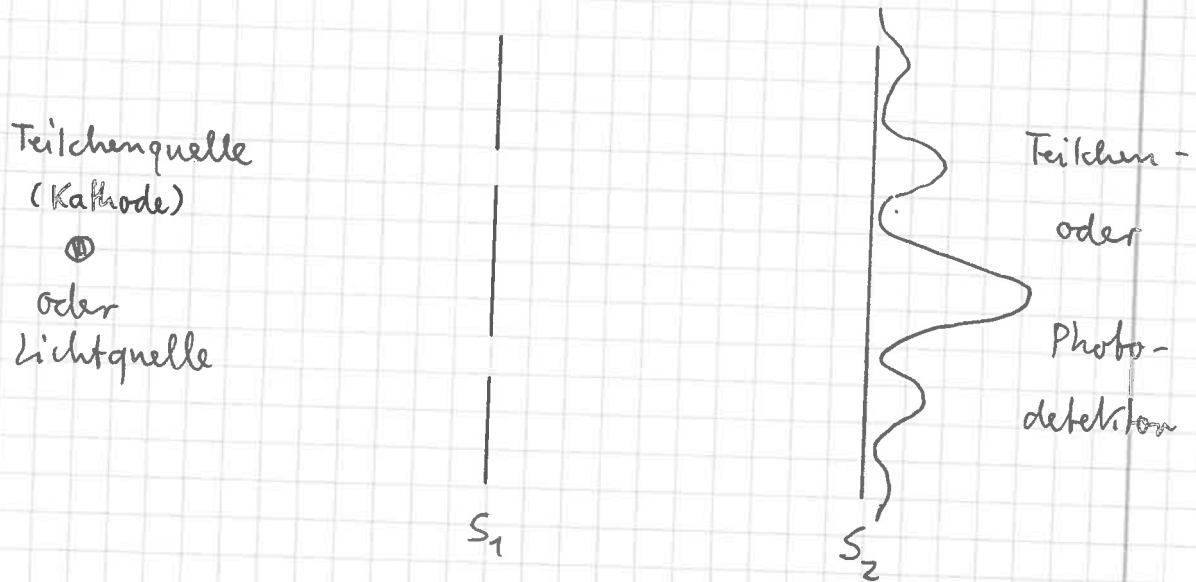
2.1. Vorbemerkungen

- Experimentelle Evidenz:
 - Energie und Impulsquantisierung
 - Welle-Teilchen-Dualität
- Erklärung durch Quantenmechanik, Ausarbeitung 1925-1930
- Zwei Formulierungen:
 - Matrizenmechanik 1925-26
W. Heisenberg, M. Born, P. Jordan
Jede Observable wird assoziiert mit einer Matrix oder einem linearen Operator. Die Observablen bilden damit eine nichtkommutative Algebra.
 - Wellenmechanik 1925
E. Schrödinger, nach Vorschlägen von L. de Broglie
Äquivalenz von MM und WM: Schrödinger 1926
 - Allgemeiner, übergeordneter Formalismus:
P. A. M. Dirac 1930
- Allgemeinste Form: Erfordert tiefe mathematische Kenntnisse.
- Wellenmechanik: Einfacherer Zugang

2.2. Der Welle-Teilchen-Dualismus

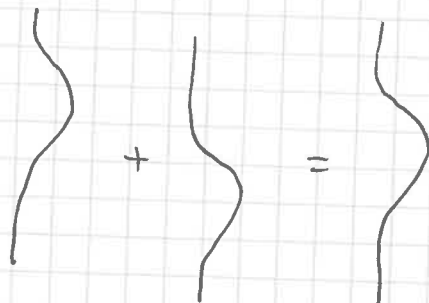
2.2.1. Das Doppelspalt-Experiment und die Wellenfunktion

a) Aufbau



b) Erscheinungen

- Zum Zeitpunkt der Detektion zeigen die Elektronen oder Photonen keine Teilchen-Eigenschaften
- Es entwickelt sich ein Interferenzmuster, wenn viele Teilchen ("identisch präparierte Ausgangssysteme") von der Quelle emittiert werden.
- Erst Spalt A verschlossen und B offen, dann umgekehrt: Verfolgung der Teilchenbahnen, keine Interferenz!
- Interferenz wird nicht durch Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung verursacht!



- Transit: Welle, Detektion: Teilchen
- Wellenerscheinung in der Teilchenstatistik

c) Forderung

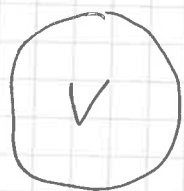
- Der Zustand des Teilchens wird beschrieben durch eine komplexe (!) Wellenfunktion

$$\begin{aligned} \underline{\Psi}: \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{C} \\ (\underline{r}, t) &\rightarrow \Psi(\underline{r}, t) \end{aligned} \quad (2.1)$$

- Sie hat die Bedeutung einer „Wahrscheinlichkeitsamplitude“
- Ihr Betragsquadrat

$$P(\underline{r}, t) := |\Psi(\underline{r}, t)|^2 = \Psi^*(\underline{r}, t) \Psi(\underline{r}, t) \quad (2.2)$$

ist eine Dichte für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit, d.h.

$$(2.3) \quad \int_V d^3\underline{r} |\Psi(\underline{r}, t)|^2$$


ist die Wahrscheinlichkeit, dass ^{das} Teilchen im Volumen V gefunden wird

- Normierung

$$\int d^3\underline{r} \Psi^*(\underline{r}, t) \Psi(\underline{r}, t) = 1 \quad (2.4)$$

d.h. Ψ ist „quadratintegrabel“.

- Ist $\Psi_1 = e^{i\alpha} \Psi_2$, $\alpha \in \mathbb{R}$, $\alpha = \text{const}$, so beschreiben Ψ_1 und Ψ_2 denselben Zustand, da $|\Psi_1|^2 = |\Psi_2|^2$.

d) Wellenfunktion beim Doppelspalt.

- Sei Ψ_A die Teilchenwelle von Spalt A, Ψ_B die von B

- Messung der Wahrscheinlichkeitsdichte am Schirm S_2 , wenn B geschlossen: $|\psi_A|^2$, Wenn A geschlossen: $|\psi_B|^2$
- Wenn beide Spalte offen:

$$|\psi_A + \psi_B|^2 = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + \underbrace{\psi_A^* \psi_B + \psi_A \psi_B^*}_{\text{Interferenzterm}} \quad (2.5)$$

e) Superpositionsprinzip

- Sei ein möglicher Zustand eines Ensembles von identisch präparierten Teilchen beschrieben durch die „Wellen-“ oder „Zustandsfunktion“ ψ_1 , ein anderer durch ψ_2 . Dann ~~gilt~~ ist jede Linearkombination

$$\Psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \quad (2.6)$$

nach Normierung eine Wellenfunktion, die einen erlaubten Ensemble-Zustand beschreibt.

f) Wichtige Anmerkungen

- $\Psi(\underline{r}, t)$ ist eine abstrakte Größe, anders als bei klassischen Wellen wie Schall oder Wasser. Ihre Interpretation ist rein statistisch.
- Aus der Wellenfunktion kann man für jede dynamische Variable (Ort, Impuls, Energie, Drehimpuls etc.) die statistische Verteilung der Messwerte ableiten.

2.2.2. Wellenfunktion für Teilchen mit scharfem Impuls

a) Wellenfunktion

- De Broglie: Wellenfunktion eines freien Teilchens mit Impuls p und Energie $E(p)$ ist ebene Welle mit Wellenvektor $\underline{k} = p/\hbar$ und Frequenz $\omega = E/\hbar$:

$$\begin{aligned} \Psi(\underline{r}, t) &= A \exp \{ i(\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega t) \} = \\ &= A \exp \{ i(p \underline{r} - Et) / \hbar \} \end{aligned} \quad (2.7)$$

b) Operatoren:

- Es gilt: $\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\underline{r}, t) = p \Psi(\underline{r}, t)$ (2.7) (2.8)
- $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\underline{r}, t) = E \Psi(\underline{r}, t)$ (2.7)

d.h. Impuls und Energie können beschrieben werden als Differenzialoperatoren.

$$p = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (2.9a) \quad E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.9b)$$

die auf die Wellenfunktion wirken

- NB! (2.8) ist eine Eigenwertgleichung.
Zustände zu scharfen Observablenwerten sind Eigenvektoren
- Wellenfunktion eines lokalisierten Teilchens?
Zu welchem Operator ist sie Eigenfunktion?

- Postulat der QM: Die Operator-Darstellung der Observablen (2.9) gelte auch, wenn das Teilchen nicht frei ist.

c) Normierung

• Es ist $|\Psi(\underline{r}, t)|^2 \stackrel{(2.7)}{=} |A|^2 d^3r$

$$\int d^3r |\Psi|^2 = |A|^2 \cdot \infty \quad (2.10)$$

- Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens mit präzisiertem Impuls ist überall gleich, Teilchen „delokalisiert“
- Impuls scharf — Ort unscharf
- Quadratintegrabilität? Ebene Welle auf endliches Gebiet beschränken!
- Folge: Impulsquantisierung, Verlust der Impulsschärfe

2.3. Beispiele von Wellenpaketen

2.3.1. Allgemeinste Superposition

- Nach 2.2.1e) gilt das Superpositionsprinzip, d.h. wenn

$$\Psi_1(\underline{r}, t) = A_1 \exp \left\{ i (\underline{p} \cdot \underline{r} - E_1 \cdot t) / \hbar \right\}$$

und $\Psi_2(\underline{r}, t) = A_2 \exp \left\{ i (\underline{p} \cdot \underline{r} - E_2 \cdot t) / \hbar \right\}$

quantenmechanische Zustände beschreiben, so auch $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$

- Mischzustand, Impuls nicht mehr genau definiert.
- Die allgemeinste Superposition ist das Integral

$$\Psi(\underline{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p \Phi(\underline{p}) \exp \left\{ i (\underline{p} \cdot \underline{r} - E(\underline{p})t) / \hbar \right\} \quad (2.11)$$

↑
Konvention

mit der Amplitudenfunktion $\Phi(p)$

- Ψ ist ein „Wellenpaket“ und i.A. normierbar.
- $\Psi(x, 0)$ und $\Phi(p)$ sind Fouriertransformierte
- Diskussion und Erläuterung anhand eines Spezialfalls in einer Dimension:

2.3.2. Das Gaußwellenpaket

a) Form

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \varphi(p) e^{i\{px - E(p)t\}/\hbar} \quad (2.12)$$

$$\varphi(p) := C \exp\left\{-\frac{(p-p_0)^2}{2(\delta p)^2}\right\} \quad (2.13)$$

- Gaußfunktion $\propto e^{-y^2}$ mit Maximum bei $p=p_0$
- $|\varphi(p=p_0 \pm \delta p)|^2 = \frac{1}{e} |\varphi(p=p_0)|^2 \quad (2.14)$

b) Normierung

- Wähle C derart, dass

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp |\varphi(p)|^2 = 1 \quad (2.15)$$

- Es folgt: $C = \pi^{-1/4} (\delta p)^{-1/2} \quad (2.16)$

c) Zur Fouriertransformation bei quadratintegrablen Funktionen

- Sei $g(k)$ quadratintegrabel, d.h.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk |g(k)|^2 < \infty \quad (2.17)$$