Grundlagen der Quantenmechanik

- Einführung in den Formalismus der Quantenmechanik basierend auf der Wellenmechanik von de Broglie Materiewellen.

    - die Quantenmechanik basiert auf einigen wenigen grundlegenden Postulaten
    - die Postulate sind nicht herleitbar
    - die Anwendung dieser Postulate erklärt experimentelle Beobachtungen mit hoher Genauigkeit.

- Hier: Betrachte ein Teilchen (Massepunkt) dessen Bewegung beschrieben ist durch die Koordinate x und den Impuls p.

    - Wellenmechanik führt zu anschaulicher Beschreibung der quantenmechanischen Eigenschaften des Teilchens.

1. Postulat der Quantenmechanik

> Der quantenmechanische Zustand eines Teilchens (Massepunkt) ist durch eine eindeutige, quadratisch integrable und im allgemeinen komplexe Wellenfunktion $\psi(x,t)$ beschrieben.

- Die Wahrscheinlichkeit P das Teilchen zur Zeit t im Intervall dx um den Ort x zu finden ist gegeben als

$$P = |\psi|^2 dx = \psi^* \psi \, dx .$$

- $|\psi|^2$ ist also die Wahrscheinlichkeitsdichte $\frac{P}{dx} = \tilde{P}$ das Teilchen am Ort x aufzufinden.

- Die Wahrscheinlichkeit das Teilchen zur Zeit t an einer beliebigen Stelle zu finden soll 1 betragen. Daher gilt für Wellenfunktionen ψ die folgende Normierung

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P} \, dx = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi \, dx}$$

für alle Zeiten t.

Beispiel des Teilchens im Potentialtopf.

Erwartungswerte

- Alle Informationen über die quantenmechanischen Eigenschaften eines Teilchens sind in seiner Wellenfunktion Ψ enthalten.
  - z.B. die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist gegeben als $|\Psi|^2$
  - alle experimentell erfassbaren Grössen $f(x,t)$ werden quantenmechanisch durch Erwartungswerte bestimmt

- Der Erwartungswert einer Grösse $f(x,t)$ ist quantenmechanisch gegeben durch

$$\boxed{\langle f(x,t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\, f(x,t)\, \Psi(x,t)\, dx}$$

  - Beispiele: $f(x,t) = x(t)$ Ortskoordinate

    $f(x,t) = V(x,t)$ potentielle Energie

Darstellung der Wellenfunktion im Impulsraum

- Äquivalente Verwendung des Impuls p als Variable der Wellenfunktion anstelle der Koordinate x

- Der q.-m. Zustand eines Teilchens ist durch eine quadratisch integrable Wellenfunktion $\phi(p,t)$ beschreibbar

  – $\phi^* \phi \, dp = |\phi|^2 dp$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen zur Zeit t einen Impuls zwischen p und $p+dp$ hat

- Normierung: $\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \phi \, dp = 1$

- Erwartungswert: $\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* g(p,t) \, \phi \, dp = \langle g(p,t) \rangle$

  - Beispiele: $g(p,t) = p(t)$ Impuls

    $g(p,t) = \frac{p^2}{2m}$ kinetische Energie

- Stehen die Wellenfunktionen im Ortsraum $\psi(x)$ und diejenigen im Impulsraum in einem besonderen Zusammenhang?

Unschärferelation für ein Gauss'sches Wellenpaket

- betrachte Teilchen mit konstanter Gesamtenergie $E = \hbar\omega$, z.B. ein Teilchen, das sich mit konstanter kinetischer Energie in einem konstanten Potential $V(x)$ bewegt.

  - Zugehöriges Wellenpaket

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, e^{i(kx-\omega t)}\, dk$$

Summe über Materiewellen mit Amplitude $A(k)$ und Wellenvektor k $\rightarrow$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{e^{-i\omega t}}_{} \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, e^{ikx}\, dk$$

hier nicht relevanter Phasenfaktor $\Rightarrow \psi^*\psi$

  - Fourier-Beziehung

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k)\, e^{+ikx}\, dk$$

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-ikx}\, dx$$

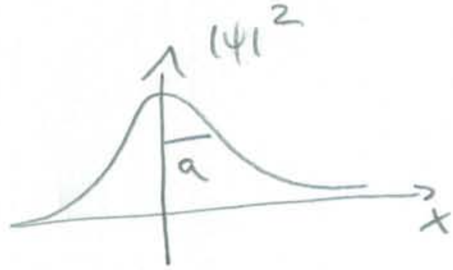
proportional zu Wellenfunktion im Impulsraum $\propto \phi(p)$

  - mit $p = \hbar k$ können wir schreiben

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\, dp$$

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, dx$$

- **Gauss-verteiltes Wellenpaket**



$$|\psi|^2 = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$$

- Normierung $\int |\psi|^2 dx = 1$
- Erwartungswert des Ortes $\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi \, dx$

$$= \int |\psi|^2 x \, dx = 0$$

- **Unschärfe des Ortes Δx**

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

$$= \langle x^2 \rangle \quad \text{für } \langle x \rangle = 0$$

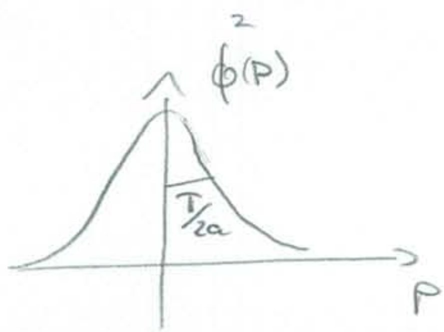
$$\Rightarrow (\Delta x)^2 = \int \psi^* x^2 \psi \, dx = \int |\psi|^2 x^2 dx = a^2$$

$\Rightarrow \boxed{\Delta x = a}$ $\Rightarrow$ Breite der Gauss-Verteilung

- **Wellenfunktion im Impulsraum**

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{4a^2}} e^{-ipx/\hbar} dx$$

$$= \left(\frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}}\right)^{1/2} e^{-\frac{a^2 p^2}{\hbar^2}}$$



$$\phi^2(p) = \frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{2a^2 p^2}{\hbar^2}}$$

- Unschärfe des Impuls Δp

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

mit $\langle p \rangle = 0$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4a^2}$$

$$\Rightarrow \Delta p = \frac{\hbar}{2a}$$

- Unschärfe relation für Gauss'sches Wellenpaket

$$\boxed{\Delta x \, \Delta p = \frac{1}{2} \hbar}$$

$\Rightarrow$ das Wellenpaket erfüllt grade die minimale Unschärfe relation