2. Welle-Teilchen-Dualismus

2.1. Materiewellen

Die Welleneigenschaften von Materie legen die Suche nach einer <u>Wellengleichung</u> nahe. Randbedingen für Wellen sind eine Ursache für das Auftreten der Quantisierung.

Stehwellen

Ein grundlegender Ausgangspunkt ist die Zuordnung der Energie *E* eines Teilchens zu einer Welle mit der Frequenz ω :

 $\omega = E/\hbar$

Die allgemeine Form einer ebenen Welle ist: $\psi(r,t)=e^{i(ec{k}ec{r}-\omega t)}$

mit der Phasengeschwindigkeit: $v_{\phi} = rac{\omega}{k}$

Die ebene Welle ist im Raum <u>delokalisiert</u>!

Lokalisierten Teilchen um einen Raumpunkt rentsprechen Wellenpakete.

$$\psi(r,t) = \int f(k)e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}dk$$

Für Teilchen mit einem (in etwa) definierten Impuls ist die Verteilung *f(k)* nur um einen kleinen Bereich *k=k_o* von Null verschieden

Beispiel: <u>Eindimensionales Wellenpaket</u>

$$\psi(x,t) = \int f(k)e^{i\phi}dk \qquad \phi = kx - \omega t$$

Wellenpaket

Der Beitrag zum Wellenpaket von k-Vektoren um einen Wert $k=k_0$ ist nur für einen Bereich Δk nennenswert:



2.2. Die Schrödingergleichung

2.2.1. Motivation

Welcher Bewegungsgleichung genügt nun das Wellenpaket $\psi(r,t)$?

Allgemeine Anforderungen an die Bewegungsgleichung:

1) Die Gleichung muss linear und homogen sein. Falls λ_1 und λ_2 Lösungen sind, dann auch $c_1\lambda_1+c_2\lambda_2$!

2) Die Gleichung muss erster Ordnung in der Zeit sein. Der Zustand des Systems ist durch $\psi(r,t)$ vollständig (und für alle Zeiten) bestimmt.

 Das Korrespondenzprinzip muss gelten. Die Struktur der Gleichungen muss f
ür "makroskopischere" Systeme in die klassischen übergehen.



E. Schrödinger (1926)

In <u>einer</u> Dimension (x) gilt:

Sei
$$\psi(x,t) = \int f(p_x) e^{i(p_x x - Et)/\hbar} dp_x$$
 mit $E = \frac{p_x^2}{2m}$
Es folgt (Zeitableitung): $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \int Ef(p_x) e^{i(p_x x - Et)/\hbar} dp_x$
und (Ableitung
nach x): $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) = \int p_x f(p_x) e^{i(p_x x - Et)/\hbar} dp_x$
 $-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) = \int p_x^2 f(p_x) e^{i(p_x x - Et)/\hbar} dp_x$
somit $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t)$ $\frac{\text{Schrödingergleichung}}{\text{für ein freies Teilchen}}$
 $= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \psi(x,t)$

Formale Zuordnung von Operatoren:

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$p_x \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$
ebenso für y und z!

225

Wie sieht die eindimensionale Schrödingergleichung für die Bewegung eines Teilchens in einem Potential V(x) aus?

Postulat:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(x,t)$$

kinetische Energie potentielle Energie

Schrödingergleichung für ein Teilchen in einem Potential

Diese Gleichung kann nicht hergeleitet werden, sondern wird postuliert. Ihre Gültigkeit muss experimentell überprüft werden!

Tatsächlich ist das Postulat korrekt. Die Schrödingergleichung lautet also:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t)$$
 mit $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$

Hist der Hamiltonoperator (engl. Hamiltonian).

2.2.2. Die zeitunabhängige Schrödingergleichung

Hängt *H* nicht explizit von der Zeit ab (konservatives System), so ist die Gesamtenergie *E* eine Konstante der Bewegung.

Mit $E = \hbar \omega$ muss $\psi(x, t)$ also die folgende Form haben:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \exp^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Einsetzen liefert die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$H\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

 $\psi_E(x)$ heisst <u>Eigenfunktion</u> des Operators *H*.

Zur vollständigen Lösung eines (zeitunabhängigen) physikalischen Problems muss $\psi_E(x)$ die Regularitäts- und Randwertbedingungen erfüllen. Zunächst heisst dies:

1) $\psi_E(x)$ muss stetig sein!

2) Die erste Ableitung von $\psi_E(x)$ muss stetig sein!

Die zeitunabhängige Schrödingergleichung ist eine Eigenwertgleichung für den Operator H!





Die Eigenwertgleichung für einen Hamiltonoperator $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ hat spezielle Eigenschaften:

1) *E<0* Die Eigenwertgleichung ist nur für bestimmte Eigenwerte *E* lösbar. Das <u>Eigenwertspektrum</u> ist diskret.

Gebundene Zustände

2) **E>0** Die Eigenwertgleichung ist für jeden Eigenwert *E* lösbar. Das <u>Eigenwertspektrum</u> ist kontinuierlich.

Ungebundene Zustände

2.3. Eindimensionale Quantensysteme 2.3.1. Einleitung

Betrachtung des speziellen Falles der eindimensionalen Bewegung eines Teilchens in einem allgemeinen Potential V(x):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi(r,t)$$

Stationäre Lösungen:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \exp^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Entsprechendes Eigenwertproblem:

$$H\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

Im folgenden benutzte Abkürzung:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} U(x)$$
 und $E = \frac{\hbar^2}{2m} \epsilon$

Somit:
$$\psi'' = (U - \epsilon) \psi$$

Allgemeines zu lösendes Eigenwertproblem

Man beschreibt eine beliebige Potentialform V(x) mit Hilfe der Zerlegung in Bereiche konstanten Potentials V_{ij} (Rechteckpotential):

$$V(x) = V_{ij} = const.$$
$$x_i \le x \le x_j$$



Man bestimmt dann die Lösungen für jeweils konstantes Potential unter der Berücksichtigung der Randbedingung:

 $\psi'(x), \; \psi(x)$ stetig für alle x.

Allgemeine Lösungen für ein bestimmtes konstantes V_i, bzw. U_i:

1)
$$\epsilon > U_i$$
 $\psi(x) = e^{\pm ik_i x}$ $k_i = \sqrt{\epsilon - U_i}$
oszillatorische Lösung
2) $\epsilon < U_i$ $\psi(x) = e^{\pm \kappa_i x}$ $\kappa_i = \sqrt{U_i - \epsilon}$
exponentielle Lösung

2.3.2. Die endliche Potentialstufe

Man betrachtet folgende Potentialform:



Die Stetigkeit der Ableitung bei x=0 liefert:

$$k_{1} \cot(\phi) = k_{2} \quad \text{somit} \quad \phi = \arctan(k_{1}/k_{2})$$

Die Stetigkeit von $\psi(x)$:

$$\frac{A_{2}}{A_{1}} = \sin(\phi) = \frac{k_{1}}{\sqrt{k_{1}^{2} + \kappa_{2}^{2}}} = \sqrt{\frac{\epsilon - U_{1}}{U_{2} - U_{1}}}$$

klassisch

$$\psi_{0}$$

$$klassisch$$

$$\int_{0}^{1} \frac{1}{1 + \kappa_{2}^{2}} \int_{0}^{1} \frac{1}{1 + \kappa_{2}^{2}} \int_{$$

Fall ii)
$$\epsilon > U_2$$

Oszillatorische Lösung im gesamten Raumbereich!

Ansatz:



Für die (Amplituden)-Reflexions- bzw. Transmissionskoeffizienten (r bzw. t) folgt aus den Stetigkeitsbedingungen:

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$
$$t = 1 + r = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}$$

Analogie zur Reflexion und Transmission von Lichtwellen an dielektrischer Grenzfläche (Fresnelkoeffizienten)!



Die Beschreibung der Bewegung eines räumlich lokalisierten Teilchens kann man mit Hilfe eines Wellenpaketes beschreiben:

$$\psi(x,t) = \int f(k_x) e^{i(k_x x - Et/\hbar)} dk_x$$

Unterschiede zur klassischen Physik:

a) Das Wellenpaket kann auch im Fall $U_2 > \epsilon > U_1$ in den (klassisch verbotenen) Bereich II eindringen

b) Das reflektierte Wellenpaket erfährt eine zeitliche Verzögerung (Phasenverschiebung im Fall einer ebenen Welle)

c) Auch für den Fall ε >U₂ gibt es eine Reflexion.

Die Reflexionswahrscheinlichkeit *R* und die Transmissionswahrscheinlichkeit *T* sind dabei:

$$R = |r|^2 = |\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}|^2$$
$$T = \frac{k_2}{k_1}|t|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

2.3.3. Der unendlich hohe Potentialtopf



 $n = 1, 2, 3, \dots$

236

2.3.4. Der harmonische Oszillator

Das harmonische Potential hat die Form:

$$U(x) = 1/2m\omega^2 x^2$$

Die Eigenenergien des harmonischen Oszillators sind (Details in Lehrbüchern zur Quantenmechanik):

$$E_n = (1/2 + n)\hbar\omega$$

Nullpunktsenergie lineare n-Abhängigkeit

Die Energieniveaus sind äquidistant!



Die Eigenfunktionen sind $\psi_n(x)$ Hermite-Polynome:

$$\psi_n(x) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n! a}} e^{-x^2/2a^2} H_n(x/a)$$

 $a = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$

2.4. Der Tunneleffekt

2.4.1. Die Tunnelbarriere

Ein sehr wichtiges Beispiel eines Rechteckpotentials ist der Potentialwall:



Für die beiden Fälle $\epsilon > U_0$ und $\epsilon < U_0$ lässt sich eine Transmissionswahrscheinlichkeit *T* durch die Barriere angeben:

$$T = \frac{4\epsilon(\epsilon - U_0)}{4\epsilon(\epsilon - U_0) + U_0^2 \sin^2(kL)} \qquad \epsilon > U_0 \qquad k = \sqrt{\epsilon - U_0}$$
$$T = \frac{4\epsilon(U_0 - \epsilon)}{4\epsilon(U_0 - \epsilon) + U_0^2 \sinh^2(\kappa L)} \qquad \epsilon < U_0 \qquad \kappa = \sqrt{U_0 - \epsilon}$$

Wie in den anderen Beispielen für Rechteckpotentiale verhält sich die Wellenfunktion

exponentiell
$$\psi(x) \approx Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$$
 $\epsilon > U_0$
oszillatorisch $\psi(x) \approx Ce^{ikx} + De^{-ikx}$ $\epsilon > U_0$





2.4.2. Der α -Zerfall

Beim α -Zerfalls ergibt sich das Gesamtpotential aus der sehr kurzreichweitigen attraktiven Kernkraft und der repulsiven Coulombkraft zwischen den positiv geladenen α -Teilchen, d.h He-Kernen (Rutherford 1908).



2.4.3. Das Tunnelmikroskop

Eine der wichtigsten direkten Anwendungen des Tunneleffektes ist das Tunnelmikroskop.

Nobelpreis 1986

Prinzip:

- 1) Elektronen tunneln durch Vakuum zwischen kleiner Spitze und leitender Fläche
- 2) Hohe Sensitivität des Tunnelstroms auf den Abstand
- 3) Bildgebung durch Abrasterung einer Probe



G. Binnig

H. Rohrer



Prinzipieller Aufbau eines STM (scanning tunneling microscope) [Interf. Phys. Group, Leiden Univ.]





€d≯

Energiebänder für Spitze und Probe ohne (links) und mit (rechts) angelegter Spannung [Interf. Phys. Group, Leiden Univ.]



Der Tunnelstrom folgt der Abhängigkeit:

$$I_T(d) \propto eV \exp\left(-2rac{\sqrt{2mV}}{\hbar}d
ight)$$

Bei einem typischen Wert von *V=4eV* folgt eine Erhöhung des Tunnelstroms um einen Faktor *1000* bei einer Abstandsänderung von nur *0.3 nm*! Dies macht STM so empfindlich!





Feedback-Loop im STM

STM erfordert eine genaue Positionierung der STM-Spitze (Å-Präzision). Zu diesem Zweck werden piezoelektische Elemente eingesetzt.





Piezoelektrika: Prinzip und 3D-Scanner [alle Bilder: Interf. Phys. Group, Leiden Univ.] Beispiel einiger STM Bilder:



Linescan und Bild von Graphit [Interf. Phys. Group, Leiden Univ.]



Atomic Corral [IBM Gallery]

2.5. Die Unschärferelation

2.5.1. Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion

Wie kann der Welle-Teilchen-Dualismus in der Quantenmechanik interpretiert werden?

 $|\psi(r)|^2 d^3r$ gibt die <u>Wahrscheinlichkeit</u> an, ein Teilchen innerhalb d^3r zu finden.



Kopenhagener Deutung von $\boldsymbol{\psi}$

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation erfordert:

$$\int |\psi(r)|^2 d^3r = 1$$

Normierung der Wellenfunktion

Man schreibt das Wellenpaket als:

$$\psi(r) = \int \phi(p) e^{i((pr-Et)/\hbar)} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$/$$
Wahrscheinlichkeits-
amplitude
Wahrscheinlichkeits-
verteilung f. Impuls
Wahrscheinlichkeits-

Das Doppelspaltexperiment in der Quantenmechanik

Hinter einer beugenden Struktur (z.B. einem Doppelspalt) weist ein Teilchendetektor einzelne Punktereignisse nach.

Die gemessene Auftreffwahrscheinlichkeit an einem bestimmten Punkt ein Ereignis zu bekommen ist jedoch ein Interferenzmuster.

Dies Interferenzmuster baut sich auf, selbst wenn immer nur ein Teilchen die Apparatur durchläuft.



Eine Interferenzerscheinung klassischer Wellen erklärt man beim Doppelspalt durch zwei Anteile er Welle, die auf zwei verschiedenen Wegen zum Detektionspunkt laufen. Dieses Konzept ist mit dem klassischen Teilchenbild unvereinbar (siehe Cartoon).



Wenn man eine Interferenzerscheinung beim Doppelspalt mit Quantenteilchen beobachtet, ist es prinzipiell nicht möglich zu sagen, welchen Weg die Teilchen genommen haben. Beschafft man sich diese **Welcher-Weg-Information** (oder ist es prinzipiell möglich, diese zu bekommen), so wird keine Interferenz beobachtet.

Teilchen- und Welleneigenschaften sind **komplementär**.

Zerfließen der Wellenpakete

Man schreibt das Wellenpaket als:



 $\psi(r)$ und $\phi(p)$ sind Fouriertransformierte voneinander.

Mit den Wahrscheinlichkeitsverteilungen können Mittelwerte der Momente x^n und p_x^n berechnet werden (hier: Beispiel eindimensionaler Fall)

$$\langle x^n \rangle = \int \psi^*(x) x^n \psi(x) \, dx \langle p_x^n \rangle = \int \psi^*(p_x) p_x^n \psi(p_x) \, dp_x$$

Beispielsweise ergibt sich für $\langle x \rangle(t)$: $\langle x \rangle(t) = \langle x_0 \rangle + v_0 t$

konstant bei freiem Teilchen

oder für die Varianz:

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

= $(\Delta x)^{2}_{0} + \kappa_{1}t + (\Delta v)^{2}t^{2}$
Konstante ≥ 0 konstant bei freiem Teilchen

Die obige Gleichung beschreibt das Zerfließen eines Wellenpaketes.

Zahlenbeispiel:

Elektron mit $\Delta x_0 \approx 10^{-10} m$ $\Delta x \approx 600 \, km$ nach 1 Sekunde Masse von 1 g und $\Delta x_0 \approx 1 \, mm$ $\Delta x = 2\Delta x_0$ nach 10^{15} Jahren

Das Zerfließen ist für makroskopische Objekte vernachlässigbar.

2.5.2. Die Heisenbergsche Unschärferelation

Aus den Eigenschaften der Fouriertransformation folgt unmittelbar für die Varianz Δx und Δp_x :

Heisenbergsche Unschärferelation

$$egin{aligned} &\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2 \ &\Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2 \ &\Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2 \end{aligned}$$

Das Gleichheitszeichen gilt für Gaußsche Wellenpakete!

Einem Teilchen können nicht gleichzeitig ein genau definierter Ort und ein genau definierter Impuls zugewiesen werden!



Breite eines Wellenpaketes im x- und p-Raum für Gaußsches Paket (links) und Rechteckpaket (rechts)

2.5.3. Unschärferelation und Messung

Ortsmessung mit einer Blende:



Zuordnung einer de Broglie Wellenlänge: $\lambda = h/p$ Beugungserscheinung: $\sin \alpha = \lambda/d = \frac{h}{p\Delta x}$ $\Delta p_x \Delta x \approx p \sin \alpha \Delta x = h$

Bemerkung: Man kann natürlich den Auftreffpunkt S' und auch *p* (über den Impulsübertrag auf den Schirm) messen, <u>nicht</u> aber S' und *p* beliebig genau voraussagen, bevor das Teilchen aufgetroffen ist.

Ortsmessung mit einem Mikroskop:



Impulsübertrag in x-Richtung nach der Streuung von einem Photon:

 $\Delta p_x \approx (h/\lambda) \sin \theta$

Ortsauflösung nach Rayleigh:

 $\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin \theta}$

somit
$$\Delta x \Delta p_x = h$$

d.h. nach der Detektion des Photons hat das Teilchen eine Orts/Impulsunschärfe, die der Heisenbergschen Unschärferelation genügt!

Ähnliche Überlegungen gelten für <u>alle</u> anderen experimentellen Konfigurationen.

2.5.4. Messprozess und Komplementarität

Wellenfunktion vor der Messung

Messung (z.B. von r) Wellenfunktion <u>nach</u> der Messung

 $\psi_0(r,t)$



 $\tilde{\psi}(r=r_0,t)$

Unmittelbar nach der Messung ist *r* genau bekannt, aber i.A. ist dann auch $\tilde{\psi} \neq \psi_0$ Die Messung der zu *r* komplementären Variablen *p* verändert *r* zwangsläufig.

"Ergebnisse von Beobachtungen, die unter verschiedenen experimentellen Bedingungen gemacht werden, können nicht notwendig in einem einheitlichen Bild zusammengefasst werden."

Fragestellung:

- Was bedeutet die Wellenfunktion $\psi(r,t)$ wirklich?
- Ist die Beschreibung der Naturvorgänge durch die Quantentheorie vollständig?
- Lassen sich die statistischen Aussagen der Quantentheorie durch verborgene Parameter erklären?

2.5.5. Welle-Teilchen-Dualismus im Licht der Komplementarität



Welle- und Teilcheneigenschaft sind zwei komplementäre Aspekte, die bei unterschiedlichen Versuchsanordnungen zu Tage treten.

Impulsübertrag auf den Spalt:
$$\Delta p_x \approx p_0 \frac{d}{D} = \frac{h}{\lambda} \frac{d}{D}$$

Damit noch Interferenzstreifen sichtbar sind muss gelten: $\Delta x < \lambda \frac{D}{d}$
 $\Delta x \Delta p_x < h$ nicht möglich!

Welcher-Weg-Information zerstört die Interferenz!