
Theoretische Quantenphysik für das Lehramt

(Lehramt an Gymnasien &
Lehramt an Regionalen Schulen)

Priv.-Doz. Dr. Reinhard Mahnke
Institut für Physik

Lehrveranstaltung Nr. 12572
(Wintersemester 2016/17: 2 SWS V + 2 SWS Ü)

V: Montag 15.00 bis 16.30 Uhr, HS II Physik, A.-Einstein-Str. 24

Ü: Mittwoch 15.00 bis 16.30 Uhr, SR 1 Physik, A.-Einstein-Str. 24

Übungsleiter: Dr. Reinhard Mahnke

Die Lehrveranstaltung begann mit der ersten
(Wiederholungs-)Vorlesung am Montag, d. 10.10.2016, 15.00
bis 16.30 Uhr, im o. g. Hörsaal des Instituts für Physik.

Literaturhinweise:

1. Hermann Haken: Synergetik. Eine Einführung, Springer, viele Auflagen seit 1977 (dt. und engl. Ausgaben)
2. Wolfgang Nolting: Grundkurs Theoretische Physik 5/1. Quantenmechanik – Grundlagen, Springer, viele Auflagen seit 2000 (dt.)
3. Peter Schmäuser: Theoretische Physik für Studierende des Lehramts 1: Quantenmechanik, Springer-Lehrbuch, 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung: Klassische und Quantenphysik	3
2	Wiederholung: Grundgleichungen der Mechanik	3
3	Wiederholung: Bilanzgleichungen	3
4	Drift–Diffusions–Dynamik	4
5	Einführung in die Mikrophysik: Welle-Teilchen-Dualismus	5
6	Licht als Korpuskel – Energie diskret	6
7	Die Schrödinger–Gleichung	8
8	Die stationäre Schrödinger–Gleichung	11
9	Der quantenmechanische harmonische Oszillator	12
10	Bewegung im Zentralkraftfeld: Das H-Atom	13

Prüfungsterminplanung: Abschlussklausur am 16. Februar 2017 (Do),
13.00 – 15.00 Uhr (2 h), Hörsaal Physik (HS II), A.-Einstein-Str. 24

1 Einleitung: Klassische und Quantenphysik

2 Wiederholung: Grundgleichungen der Mechanik

1. *Vorlesung am 10.10.2016* (R. Mahnke)

Nichtlineare dynamische Systeme
Deterministische Dynamik
Newton–Formalismus
Lagrange–Formalismus
Hamilton–Formalismus
Phasenraumerhaltung
Elliptische und hyperbolische Fixpunkte
Reguläre und irreguläre (chaotische) Bahnkurven (Trajektorien)

1. *Übung am 12.10.2016* (R. Mahnke)

Harmonischer Oszillator (Federschwinger)
Mathematisches Pendel
Diskussion der Phasenraumdynamik

3 Wiederholung: Bilanzgleichungen

2. *Vorlesung am 17.10.2016* (R. Mahnke)

Einführung der Phasenraumdichte
Vergleich mit Wahrscheinlichkeitsdichte
lokale und globale Bilanzgleichungen
Liouville Gleichung als lokaler Erhaltungssatz der Phasenraumdichte
Poisson–Klammer
Von Neumann'sche Bewegungsgleichung
Erhaltungsgrößen (z. B. mechanische Energie)
Winkel- und Wirkungsvariable (z. B. Drehimpuls)

2. *Übung am 19.10.2016* (R. Mahnke)

Zentralkörperbewegung
Senkrechter Wurf nach oben
Henon-Heiles-System

4 Drift–Diffusions–Dynamik

3. *Vorlesung am 24.10.2016* (R. Mahnke und Ch. Bräuning)

Zufällige und deterministische Dynamik

Einfluss von Störungen, Rauschen, Fluktuationen (Stochastik)

Drift–Diffusions–Gleichung (Langevin Gleichung, Fokker–Planck–Gleichung)

Spezialfälle (nur deterministische Bewegung oder

reine Zufallsbewegung)

Diffusionsgleichung und ihre Lösung mit Angabe der Momente

Berücksichtigung von Rändern (Diffusion im endlichen Intervall)

Superpositionslösung aus Eigenzuständen mit diskreten Wellenzahlen

Einfluss konstanter Drift und Diffusion

Gleichförmig bewegtes zerfließendes Wellenpaket, dessen Unschärfe wächst

3. *Übung am 26.10.2016* (R. Mahnke)

Deterministisches Henon-Heiles-System

Diffusion im endlichen Intervall mit reflektierendem und absorbierendem Rand (Anfangs-Randwert-Problem)

- 3a. *Übung am 02.11.2016* (Ch. Bräuning und R. Mahnke)

Diffusion im endlichen Intervall mit reflektierendem und absorbierendem Rand (Anfangs-Randwert-Problem):

Transformation der geg. Gleichungen im Ortsraum: $y = x - a = x - (L/2)$; Separationsansatz einsetzen in Diffusionsgleichung; Lösungen: exponentielle Zerfallsfunktion und Wellengleichung; Ermittlung der Konstanten in der Wellengleichung durch Berücksichtigung der Randbedingungen; Diskrete Wellenzahlen $k_m \rightarrow$ Eigenwerte \rightarrow Eigenfunktion $p_m(y, t)$; Vollständige Lösung durch Superposition aller Eigenfunktionen; Nutzung der zeitlichen Anfangbedingung, der Orthogonaleigenschaften und trigonometrischen Umformungen $\rightarrow p(y, t)$; Inverse Transformation $\rightarrow p(x, t)$ für das spezielle Randwert-Problem; Diskussion der Lösung: Einfluss der Kontrollparameter; $p(L \rightarrow \infty) = 0$ ergibt sich direkt aus Lösung; Ausflussrate aus Bilanzgleichung ermitteln (nur qualitativ mit Skizze)

5 Einführung in die Mikrophysik: Welle-Teilchen-Dualismus

4. Vorlesung am 07.11.2016 (R. Mahnke)

Mikrophysik: Atome, Kerne, Elementarteilchen

Atomistische Betrachtungsweise:

Atommasse $\approx 10^{-27}$ kg, Atomradius $\approx 10^{-10}$ m

Rutherford: Atommodell und Streuversuche (1906/07)

Elektronenmasse: $m_e = 9.110 \cdot 10^{-31}$ kg

Millikan-Versuch zur Messung der Elektronenladung:

$e = 1.602 \cdot 10^{-19}$ As

Quanten-Hall-Effekt: $e = 1.602\,176\,6208(98) \cdot 10^{-19}$ C

Planck'sches Wirkungsquantum h bzw. $\hbar = h/2\pi = 1.055 \cdot 10^{-34}$ Js

de Broglie-Impuls-Beziehung (Welle-Teilchen Dualismus)

Photonen als Lichtteilchen (Energiequanten)

Unterschied zur klassischen Physik: Messprozess ist wesentlich

Heisenbergsche Unbestimmtheitsrelation (Orts- und Impuls-Unschärfe kann nicht beliebig klein werden)

$$\Delta q_i \Delta p_i \geq \hbar/2$$

5. Übung am 09.11.2016 (R. Mahnke)

Grundgleichungen der Elektrodynamik in lokaler Schreibweise (Maxwell'sche Differentialgleichungen). Wellengleichung im Vakuum. Vergleich mit Diffusionsgleichung. Lösung der homogenen Wellengleichung (ebene Welle). Ausblick auf inhomogene Wellengleichung?

Welle-Teilchen-Dualismus: „Licht als Teilchen“ beim Photoeffekt

6 Licht als Korpuskel – Energie diskret

5. Vorlesung am 14.11.2016 (R. Mahnke)

Photoelektrischer Effekt: Licht auf Metalloberfläche, Energie der herausgelösten Elektronen ist durch Frequenz des eingestrahlteten Lichtes gegeben, nicht durch Intensität (Einstein-Formel)

Compton-Streuversuche: Wechselwirkung energiereicher Photonen mit quasifreien Elektronen; Energie- und Impulsbilanz beim Stoß führt auf Wellenlängenänderung (Compton-Streuformel)

Max Planck am 19.10.1900 in Berlin auf einer Sitzung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft zur Wärmestrahlung eines Schwarzen Körpers (Strahlungsgesetz): Geburtsstunde der Quantenphysik

Max Planck hatte 1900 als erster erkannt, dass die Energie der elektromagnetischen Strahlung *nicht als eine stetige, unbeschränkt teilbare, sondern als eine diskrete, aus einer ganzen Zahl von endlichen gleichen Teilchen zusammengesetzte Größe aufzufassen ist*, somit körnig ist.

Wellenaspekt der Materie tritt erst im atomaren Bereich in Erscheinung. Für Energie und Impuls von Photonen (Lichtquanten als masselose Teilchen) gilt (de Broglie – Relation)

$$E = \hbar\omega = hf \quad \text{und} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{h}{\lambda}\vec{e}_k .$$

Die Dispersionsrelation für Licht lautet $\omega = \omega(k) = ck$.

Suchen Dispersionsrelation für Materiewellen. Aus Teilchenbild $E = \vec{p}^2/(2m) + U$ folgt mit de Broglie – Relation der Ausdruck

$$\omega = \omega(k) = \hbar/(2m) \vec{k}^2 + (1/\hbar) U .$$

Die einfachste dazu passende Wellengleichung ($\Phi = \Phi(\vec{r}, t)$)

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi + U \Phi$$

heißt zeitabhängige Schrödinger-Gleichung.

6. Übung am 16.11.2016 (R. Mahnke)

Unter Verwendung der Unbestimmtheitsrelation

$$\Delta q_i \Delta p_i \geq \hbar/2$$

kann der kleinste Energiewert des eindimensionalen harmonischen Oszillators ermittelt werden. Die Grundzustandsenergie beträgt $E_0 = \hbar\omega/2$.

Das endliche Energieminimum beim Wasserstoffatom kann ebenfalls mithilfe der Unbestimmtheitsrelation berechnet werden. Das Modell eines Wasserstoffatoms besteht aus einem Proton (im Koordinatenursprung ruhend) und einem Elektron im Abstand r mit Coulomb-Wechselwirkung. Die Modell-Hamilton-Funktion des H-Atoms lautet

$$H(q, p) = T + V = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = E .$$

Der (quantenmechanische) Bohrsche Radius $r_B = 4r_{min}$ ist der kleinste Abstand $r_B = \frac{\hbar^2}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} = 0.529 \cdot 10^{-10}$ m.

Schätzen Sie mithilfe der Unbestimmtheitsrelation ab, wie groß die kinetische Energie eines freien Nukleons (Masse $m = 1.7 \cdot 10^{-27}$ kg) in einem Atomkern (Radius $r = 10^{-15}$ m) mindestens ist.

Ergebnis: $T_{min} = 0.614 \cdot 10^{-12}$ J = 3.83 MeV.

7 Die Schrödinger–Gleichung

6. Vorlesung am 21.11.2016 (R. Mahnke)

Vergleich zwischen Licht und Materiewellen

Licht: lineare Dispersionsrelation, homogene Wellengleichung (zweifache Zeitableitung), ebene Welle als Lösung sowohl mit t als auch $-t$.
Was passiert bei Zeitumkehr $t \rightarrow -t$? Nichts, invariant in der Zeit.

Materiewelle: quadratische Dispersionsrelation, Schrödingergleichung (einfache Zeitableitung), für freies Teilchen Lösung als ebene Welle in eine Zeitrichtung.

Was passiert bei Zeitumkehr $t \rightarrow -t$? Invaranz nur, wenn $i \rightarrow -i$, d. h. Übergang zur konjugiert komplexen Wellenfunktion.

Lokale Bilanzgleichung lautet am Ort \vec{r} zur Zeit t

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j} = q .$$

Lokaler und globaler Erhaltungssatz ($q = 0$):
Gültig bei Schrödinger–Gleichung

$$\frac{\partial \varrho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0$$

mit Wahrscheinlichkeitsdichte

$$\varrho(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t)\Phi^*(\vec{r}, t)$$

und Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\Phi^*(\vec{r}, t)\nabla\Phi(\vec{r}, t) - \Phi(\vec{r}, t)\nabla\Phi^*(\vec{r}, t)] .$$

7. Übung am 23.11.2016 (R. Mahnke)

Unter Verwendung des Modells eines *Schwarzen Hohlraum-Körpers* lautet die räumliche spektrale Energiedichte

$$w_\omega = \frac{dw}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} f(\omega, T)$$

der elektromagnetischen Strahlung der Kreisfrequenz ω ($0 < \omega < \infty$) bei einer konstanten Temperatur T des Körpers.

Analoge Größen zu dem gegebenen w_ω sind die entsprechenden Größen w_ν , w_k und w_λ . Mittels $w_\omega d\omega = w_\nu d\nu = w_k dk = w_\lambda d\lambda$ können sie ineinander umgerechnet werden.

Für die unbekannte Funktion $f(\omega, T)$ ermittelte Max Planck einen Ausdruck der mittleren Energie eines harmonischen Oszillators

$$f(\omega, T) = \langle \epsilon \rangle (\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}.$$

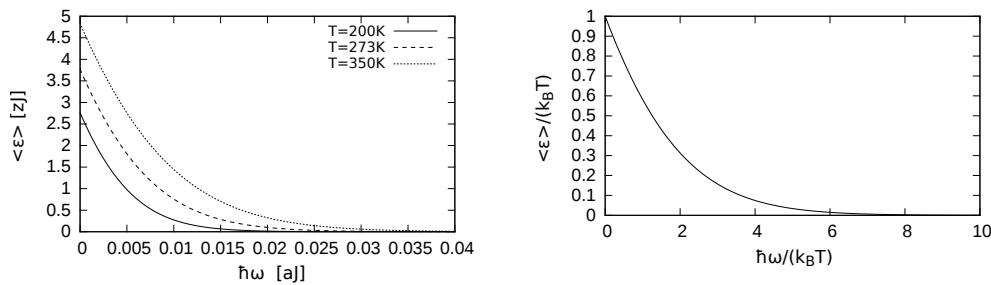


Abb. 1: Mittlere Energie eines harmonischen Oszillators (links). Dimensionslose Darstellung (rechts). Grafiken: Martins Brics (2016).

Die Planck'sche Strahlungsformel für die Energiedichte

$$w_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \langle \epsilon \rangle = \frac{1}{\pi^2 \hbar^2 c^3} \frac{(\hbar\omega)^3}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1}$$

wird grafisch als Funktion der Kreisfrequenz ω bei großer, mittlerer und kleiner Temperatur T dargestellt.

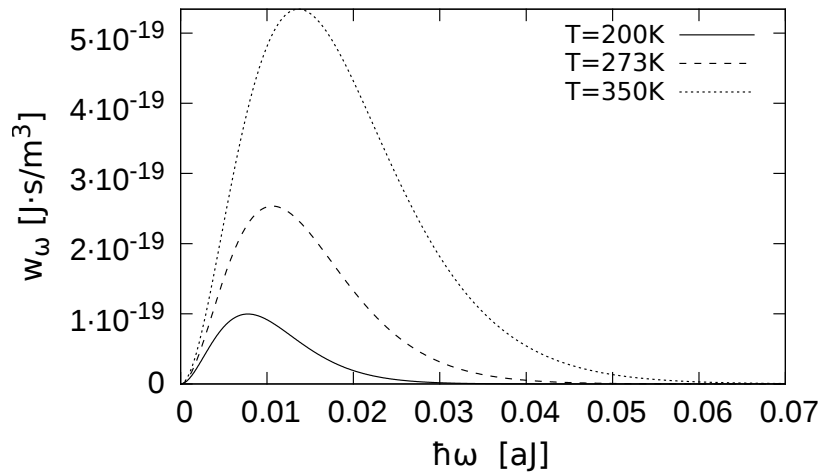


Abb. 2: Planck'sche Strahlungsformel: Energiedichte über Kreisfrequenz bei unterschiedlichen Temperaturen. Grafik: Martins Bries (2016).

Das bestimmte Integral

$$W(T) = \int_0^\infty w_\omega(\omega, T) d\omega = I \frac{1}{\pi^2 (\hbar c)^3} (k_B T)^4$$

liefert das Stefan-Boltzmann-Gesetz $W(T) \sim T^4$, wobei für den Wert des Integrals I gilt

$$I = \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}.$$

8 Die stationäre Schrödinger–Gleichung

7. Vorlesung am 28.11.2016 (R. Mahnke)

Die Schrödinger–Gleichung beschreibt die zeitliche Entwicklung eines Systems in der Quantenphysik; siehe Streu–Experiment. Die Bewegungsgleichung lautet

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H \Phi(\vec{r}, t)$$

mit

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + U(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2 + U(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}) .$$

Die unter Beachtung der Normierungsbedingung berechnete Lösung $\Phi(\vec{r}, t)$ beschreibt Entwicklung in die Zukunft.

Mit Hilfe des Separationsansatzes $\Phi(\vec{r}, t) = e^{-(i/\hbar)Et} \phi(\vec{r})$ wird die zeitunabhängige Schrödinger–Gleichung ermittelt. Die stationäre quantenmechanische Grundgleichung lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi(\vec{r}) + U(\vec{r}) \phi(\vec{r}) = E \phi(\vec{r}) .$$

Reduktion auf eine Dimension (nur x -Koordinate):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + U(x) \phi(x) = E \phi(x) .$$

Beispiele:

- a) Freies Teilchen $\rightarrow U(x) = 0$
- b) Harmonischer Oszillator $\rightarrow V(x) = (m/2)\omega^2 x^2$
- c) Unendlich hoher Potentialtopf
- d) Doppelmuldenpotential (Tunneleffekt)

9 Der quantenmechanische harmonische Oszillator

8. *Vorlesung am 05. + 12.12.2016* (R. Mahnke)

Stationäre Schrödinger-Gleichung (Ortsdarstellung). Zu lösen ist Eigenwertproblem

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + U(x)\phi(x) = E\phi(x) .$$

mit harmonischem Potential

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 .$$

Sommerfeldsche Polynommethode liefert Energieeigenwerte E_n und Eigenwellenfunktionen $\phi_n(x)$.

Energiespektrum ($n = 0, 1, 2, \dots$) lautet

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) .$$

Kontrollfragen zum linearen Oszillator in klassischer und quantenmechanischer Beschreibung:

- (a) Bewegungsgleichungen mit Hamilton-Funktion bzw. Hamilton-Operator
- (b) Energiewerte bzw. Energiespektrum
- (c) Lösungen der Bewegungsgleichungen (Trajektorien bzw. Wellenfunktionen)
- (d) Vergleich klassischer und quantenmechanischer Aufenthaltswahrscheinlichkeiten
- (e) Erweiterung auf den mehrdimensionalen harmonischen Oszillator
- (f) Wie erfolgt der Übergang zum freien Teilchen?
Bewegung eines freien Teilchens in einem unendlich hohen Potentialtopf.

10 Bewegung im Zentralkraftfeld: Das H-Atom

9. *Vorlesung am 19.12.2016* (R. Mahnke)

Gast: Prof. Peter Wagner, DLR Berlin

Grundlagen zur quantenmechanischen Beschreibung des H-Atoms

10. *Übung am 21.12.2016* (R. Mahnke)

Lösung der radialen stationären Schrödingergleichung im Spezialfall Grundzustand ($n = 1, l = 0$): $R_{10} = 2 a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$

Diskussion der Wellenfunktion und der radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Diskussion der Radialgleichung unter Verwendung des effektiven Potentials

11. *Vorlesung und Übung am 04.01.2017* (R. Mahnke & Ch. Bräuning)

Vorlesung zum H-Atom (Zusammenfassung und Diskussion):

- (a) Ausgangspunkt: zeitabhängige Schrödingergleichung mit Hamilton-Operator H für H-Atom
Besonderheit: Potential (Coulomb-Energie) nur abstandsabhängig $V = V(r)$
- (b) Ziel: zeitabhängige Wellenfunktion ist zu berechnen $\Phi = \Phi(r, \theta, \varphi, t)$
- (c) Separationsansatz in Radial- und Winkelanteil:
 $\Phi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$
- (d) Eigenwertgleichung (stationäre Schrödingergleichung) ist zu lösen:
 $H \Phi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = E_n \Phi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$
Energieniveaus $E_n = \hbar\omega_n = 13.6 \text{ eV } 1/n^2$ sind entartet, d. h. nur abhängig von Hauptquantenzahl $n = 1, 2, \dots$
- (e) Vollständige Lösung ist eine Superposition von Eigenfunktionen
 $\Phi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{+l} c_{nlm} \Phi_{nlm}(r, \theta, \varphi) e^{-i\omega_n t}$
- (f) Komplexe Koeffizienten c_{nlm} folgen aus Anfangsbedingung:
 $\Phi_0 = \Phi(r, \theta, \varphi, t = 0)$
- (g) Korrespondenzprinzip: Im Grenzfall großer Quantenzahlen gehen die Aussagen der Quantenphysik in die der klassischen Physik über.

Übung zum (historischen) Bohrschen Atommodell:

- (a) Was beschreibt das Rutherford'sche Atommodell nicht richtig?
- (b) Bohrsche Postulate \rightarrow Begriffe: stationäre Bahnen, Energieniveau, Quantenbedingung, Quantenzahl
- (c) Berechnung der stationären Radien und zugehörigen Energien aus dem klassischen Ansatz über Coulombkraft und Zentripetalkraft für H-Atom
- (d) Skizze für Energieniveaus des H-Atoms und Spektralserien
- (e) Diskussion: Leistungen und Grenzen des Bohrschen Atommodells
- (f) Skizze: Schnitt durch das H-Atom entlang der x -Achse \rightarrow Vergleich von Wahrscheinlichkeitsdichte für Grundzustand nach Schrödinger und Lage der Kreisbahn im Bohrschen Atommodell