

# Vorlesung Nanostrukturphysik IIa

## 2 – Grundlagen der Quantenmechanik

---

Sommersemester 2022

---

Prof. Dr. U. Hartmann





2.1 Beispiele für Quantenphänomene

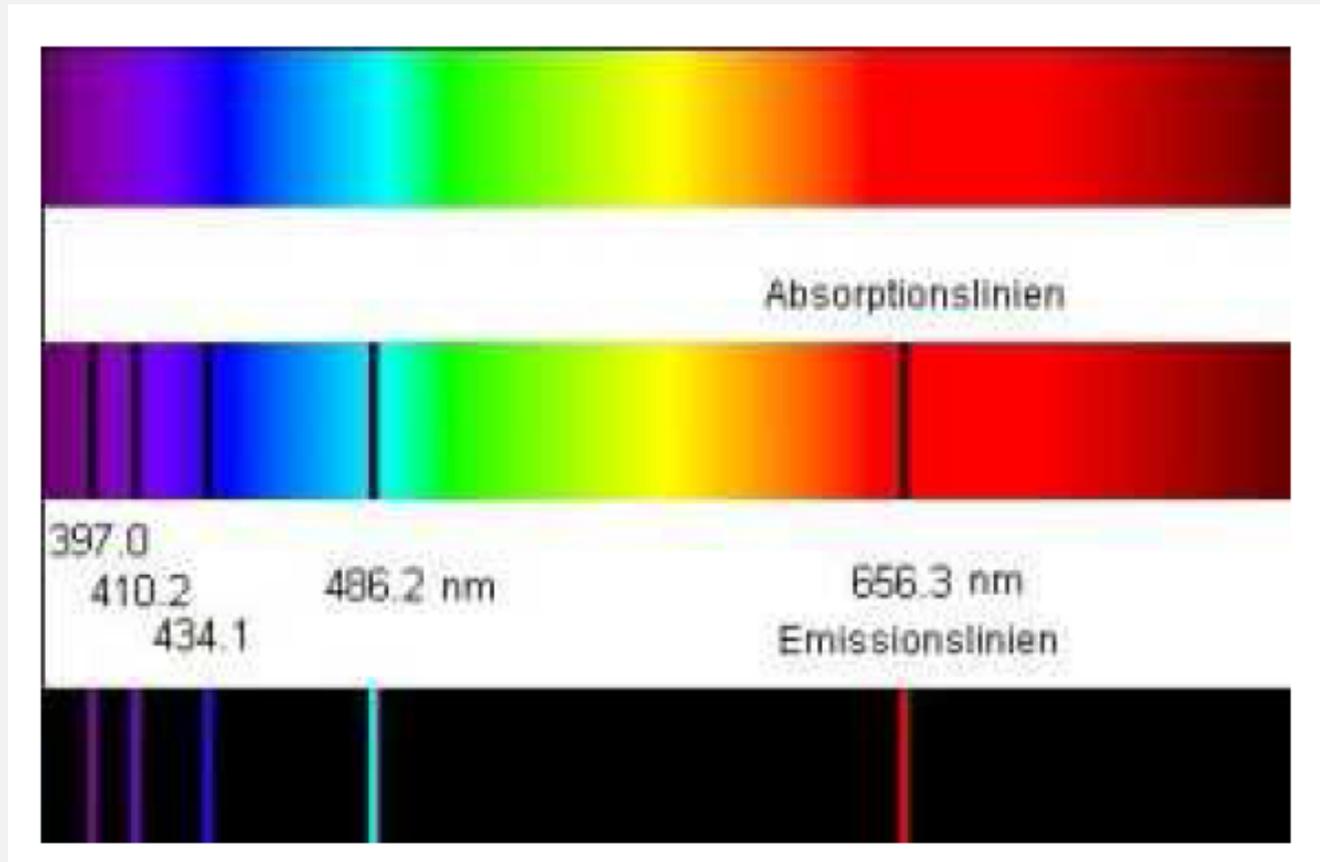
2.2 Licht als Welle

2.3 Licht als Teilchen

2.4 Axiome der Quantenmechanik



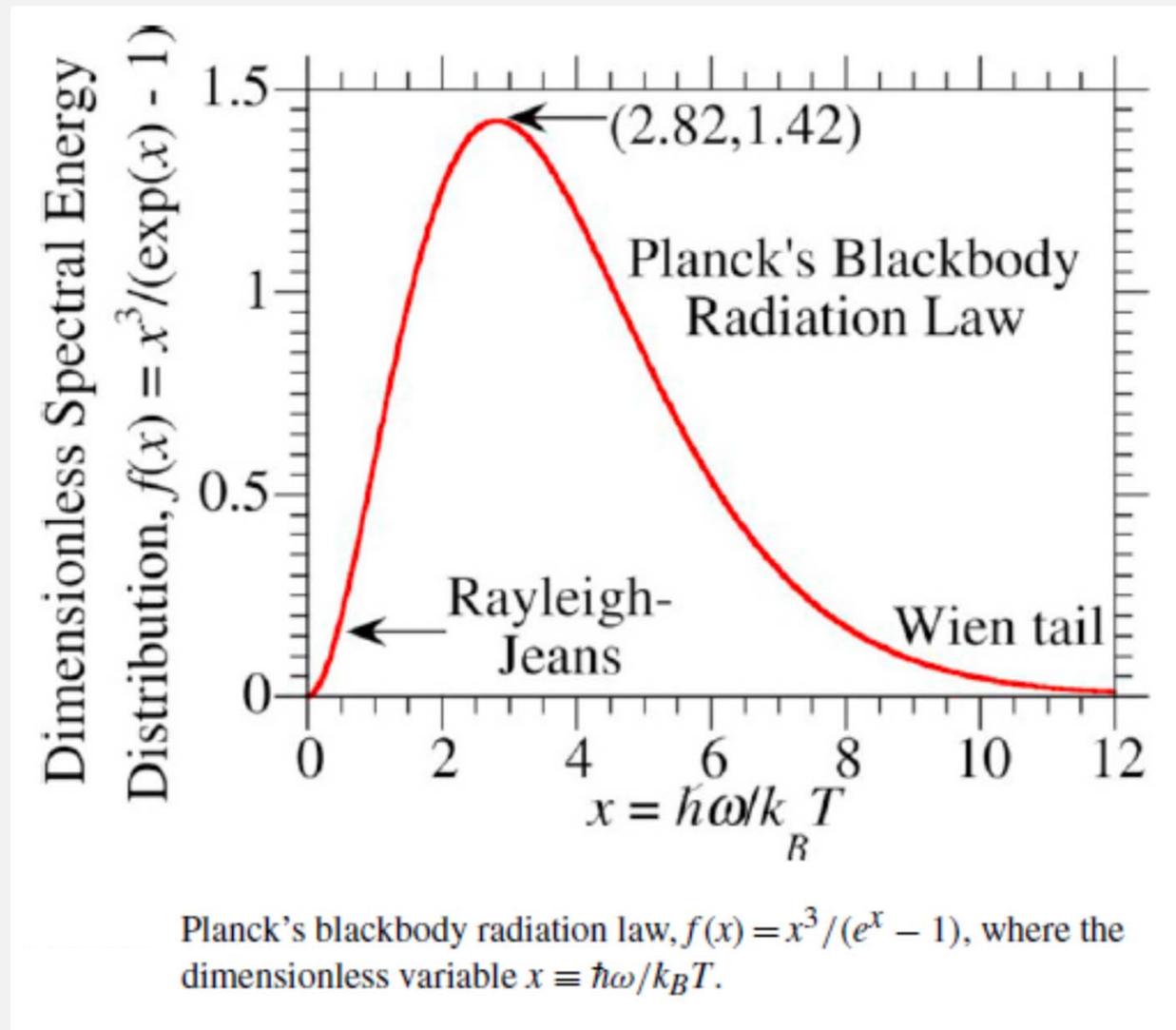
## 2.1 Beispiele quantenmechanischer Phänomene



→ Linien können ohne QM nicht erklärt werden!

<http://lejoose.tistory.com/27>

## Schwarzer Strahler





## WICHTIG:

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

System mit Wirkung oder Drehimpuls  $\eta \sim h$ : **quantenmechanische Beschreibung**

$\eta \gg h$ : **System verhält sich klassisch**



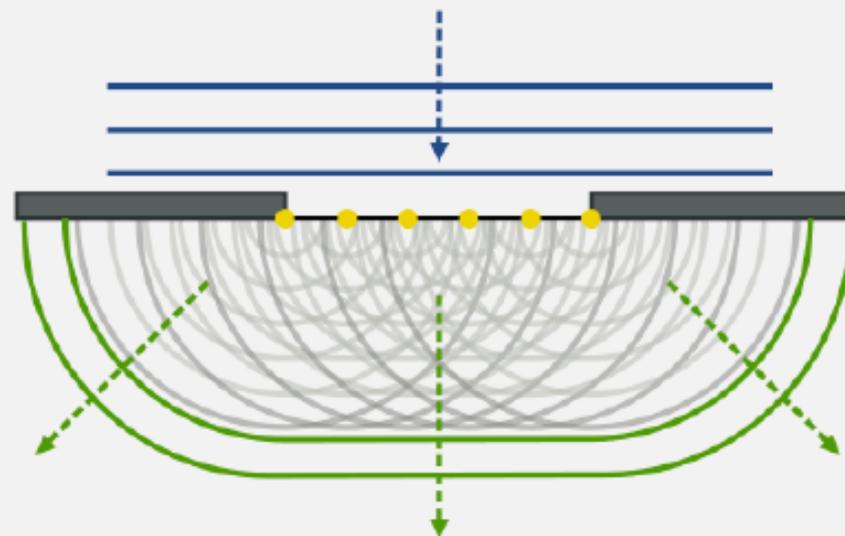
Quantenobjekte sind gleichzeitig  
Wellen **und** Teilchen

⇒ Welle-Teilchen-Dualismus

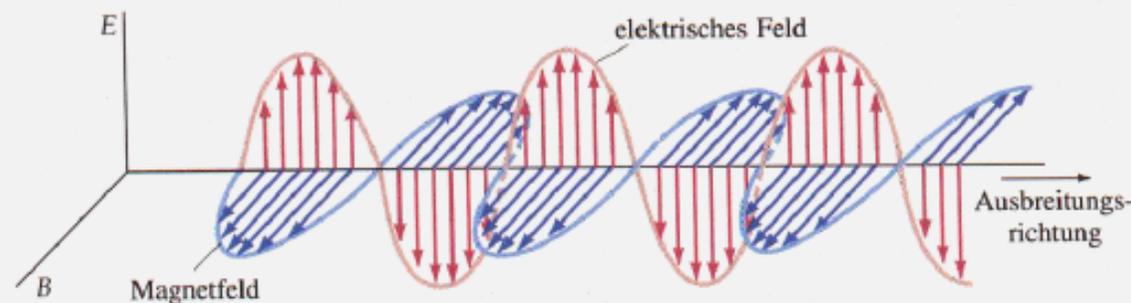


## 2.2 Licht als Welle

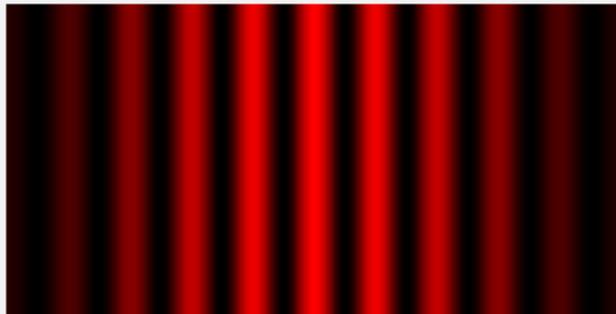
- **Huygens**, im 17. Jahrhundert: Begründer der Wellentheorie des Lichts
- **Young**, 1802: Doppelspaltversuch, Licht als Welle
- **Maxwell**, 1864: Maxwell-Gleichungen
- **Hertz**, 1888: Licht besteht aus elektromagnetischen Wellen



- Zeitliche und räumliche periodische Schwingungen
- Keine Ortsbeschränkung, sie breiten sich im Raum aus
- Sie können sich durch Überlagerung verstärken oder abschwächen
- Sie könne gleichzeitig an verschiedenen Stellen mit unterschiedlichen Stärken einwirken
- Zeitliche Frequenz:  $\omega = \frac{2\pi}{T}$
- Räumliche Frequenz:  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$



- Thomas Young (1773-1829): Doppelspaltversuch
- Licht durch zwei schmale Spalten einer Schlitzblende
- Interferenzmuster auf Schirm ( $d \gg a$ ) beobachtbar
- Bestätigung für die Wellennatur des Lichts



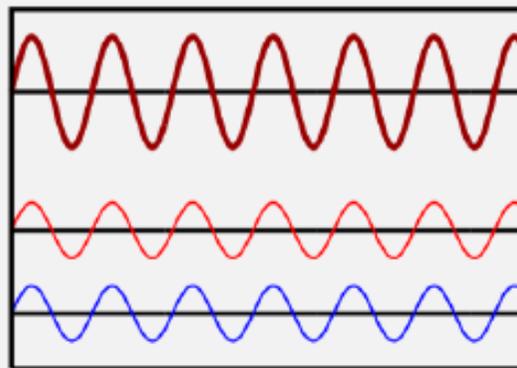
[de.wikipedia.org/wiki/Doppelspaltexperiment](https://de.wikipedia.org/wiki/Doppelspaltexperiment)

[www.chemgapedia.de/vsengine/media/vsc/de/ch/13/pc/analytik/aas/images/aas4\\_tw\\_3.gif](http://www.chemgapedia.de/vsengine/media/vsc/de/ch/13/pc/analytik/aas/images/aas4_tw_3.gif)

- Überlagerung von zwei Wellen führt zu Interferenz
- In Abhängigkeit zur relativen Phase der beiden Wellen kommt es zur konstruktiven oder destruktiven Interferenz

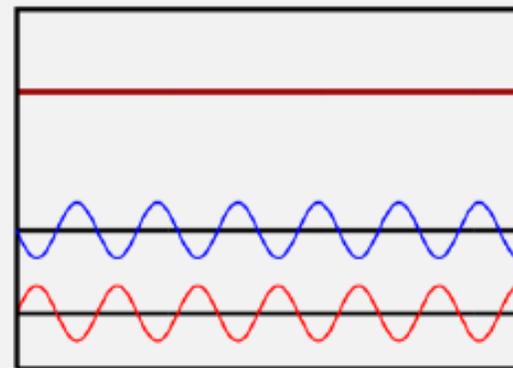
$$A \cdot \sin(kx) + B \cdot \sin(kx + \varphi)$$

Konstruktiv



$$\varphi = 0$$

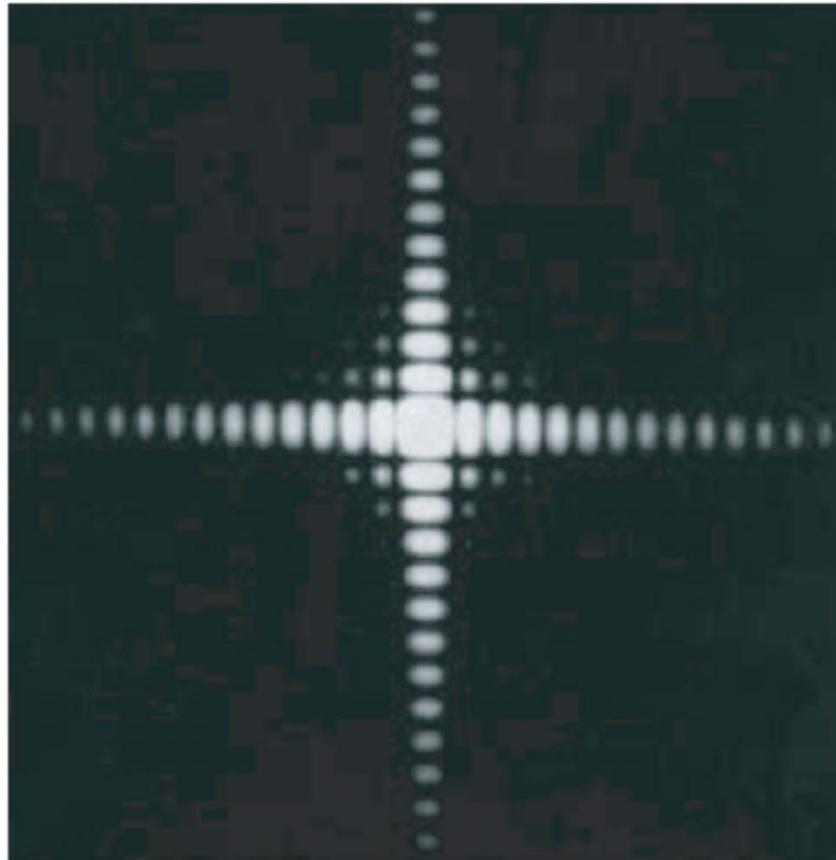
Destruktiv



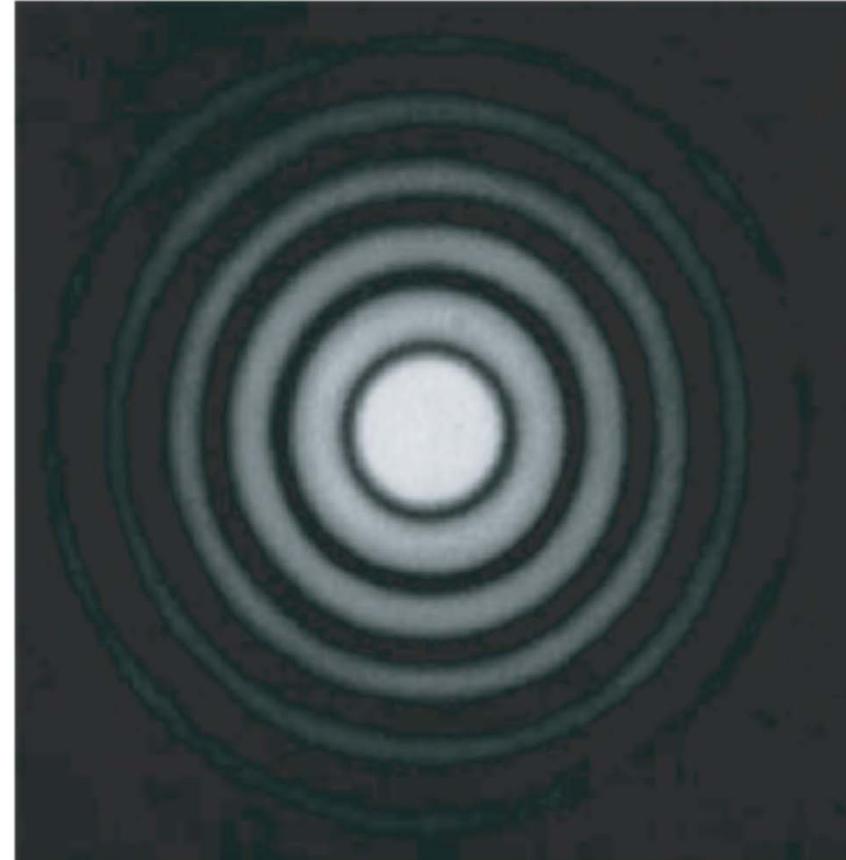
$$\varphi = \pi/2$$

[de.wikipedia.org/wiki/Interferenz\\_\(Physik\)](https://de.wikipedia.org/wiki/Interferenz_(Physik))

## Beugung



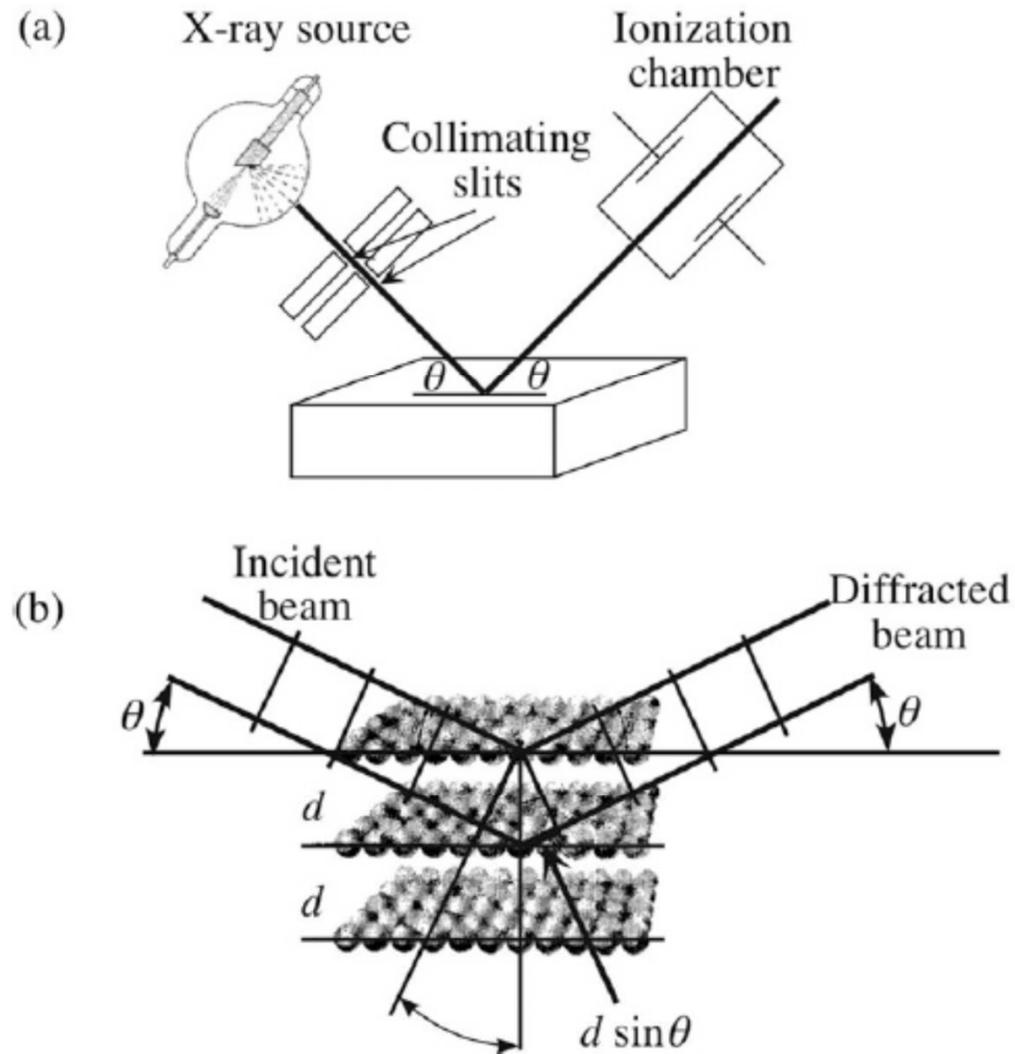
(a)



(b)

(a) Diffraction pattern from a square aperture in an opaque wall. (b) Diffraction pattern for a circular aperture. The intensity patterns are measured on a screen sufficiently far behind the wall.

## Beugung



(a) Diagram of an x-ray spectrometer for investigating crystal structure. (b) Spectral reflection by Bragg scattering. (Adapted from Pauling, *General Chemistry* [19].)

- James Clerk Maxwell (1831-1879): Maxwell-Gleichungen
- Maxwell-Gleichungen beschreiben Licht als Welle
- Vorstellung Licht als Welle gilt als bewiesen

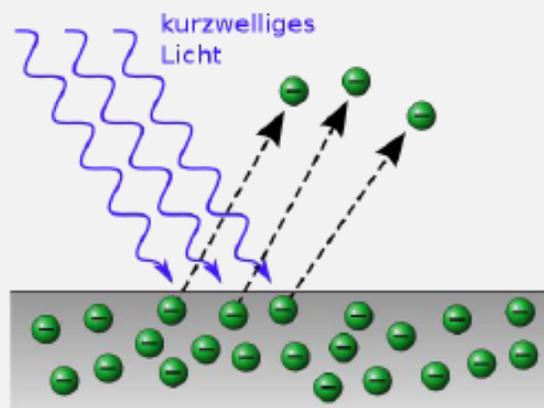
$$\begin{aligned}\nabla \vec{E} &= \rho \\ \nabla \times \vec{B} &= \vec{j} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \\ \nabla \vec{B} &= 0 \\ \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}\end{aligned}$$





## 2.3 Licht als Teilchen

- **Newton**, im 17. Jahrhundert: „Licht besteht aus Teilchen“
- **Planck**, 1900: Planck'sche Strahlungsformel, Quantisierung des Lichtfeldes
- **Einstein**, 1905: Erklärung des äußeren Photoelektrischen Effektes
- **Compton**, 1922: Inelastische Streuung von Röntgenstrahlung, Impuls der Lichtteilchen



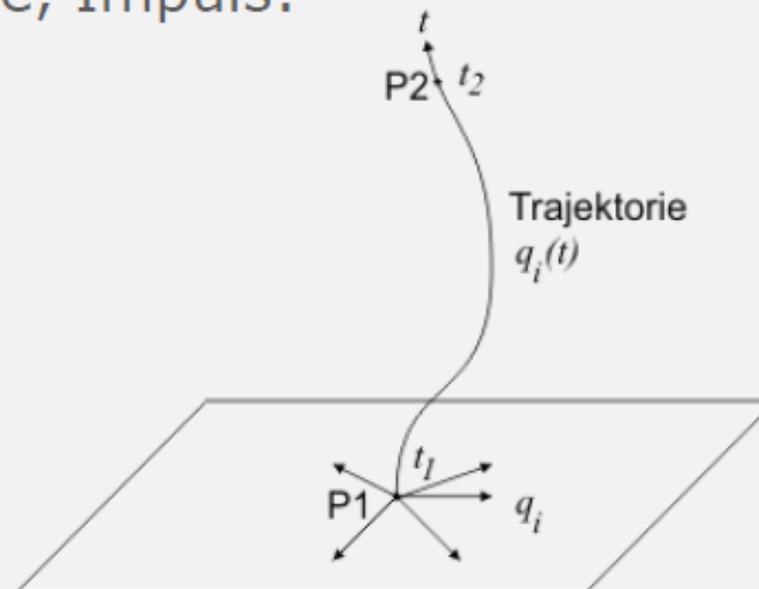
[de.wikipedia.org/wiki/Photoelektrischer\\_Effekt](https://de.wikipedia.org/wiki/Photoelektrischer_Effekt)

- Teilchen sind „lokalisiert“, d.h. ein Teilchen kann zu einem Zeitpunkt nur an einem Ort anwesend sein
- Teilchen bewegen sich auf einer Bahn: Trajektorie
- An dem Punkt wirkt ein Teilchen stets mit seiner gesamten Energie, Impuls:

$$\rightarrow E = \frac{1}{2}mv^2$$

$$\rightarrow p = mv$$

$$\rightarrow F = ma$$



[walter.bislins.ch/physik/media/Trajektorie.jpg](http://walter.bislins.ch/physik/media/Trajektorie.jpg)



- Welleneigenschaften  $\omega$  und  $k$  werden mit den Teilcheneigenschaften verknüpft
- Photon hat eine definierte Energie und Impuls

---

Klassische Mechanik

Licht als Teilchen

$$E = \frac{1}{2}mv^2$$

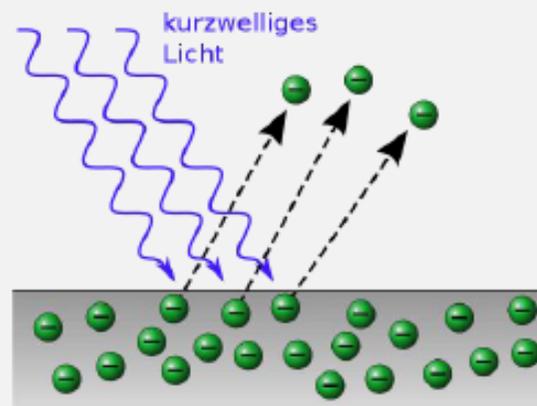
$$E = \hbar\omega$$

$$p = mv$$

$$p = \hbar k$$

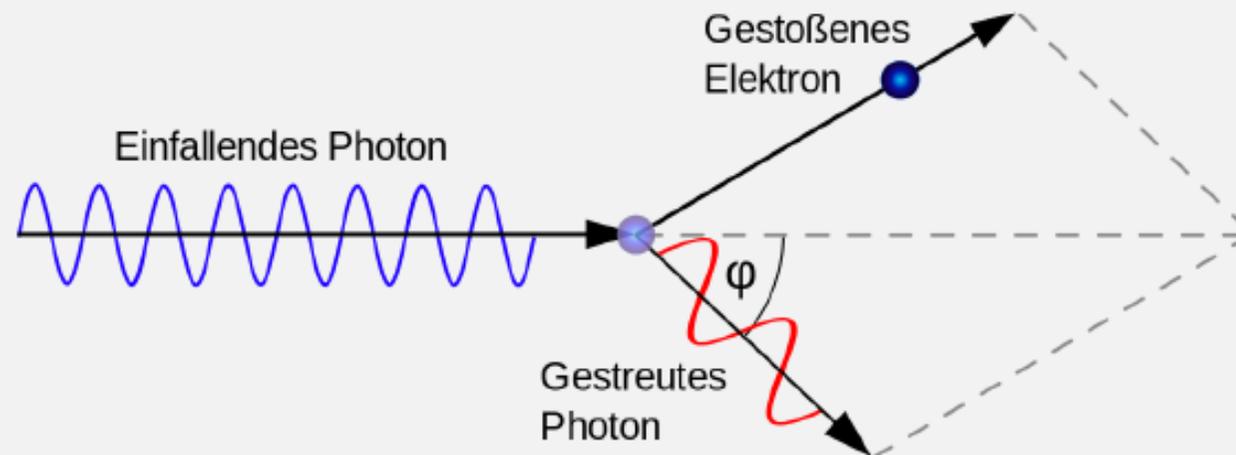
---

- **Planck** (1900): Licht ist ein Strom bestehend aus Teilchen, den sog. Photonen mit  $E = \hbar\omega$
- **Einstein** (1905): Erklärung des äußeren Photoelektrischen Effektes
  - Licht trifft in einzelnen Portionen auf Metall
  - Photon überträgt seine Energie auf ein Elektron
- 1921 Nobelpreis für Physik, erste Bestätigung der Teilchennatur von Licht



[de.wikipedia.org/wiki/Photoelektrischer\\_Effekt](https://de.wikipedia.org/wiki/Photoelektrischer_Effekt)

- **Compton-Effekt:** die Vergrößerung der Wellenlänge eines Photons bei der Streuung an einem Teilchen
- 1922 untersucht Compton die Streuung von Röntgenstrahlen an Graphit
- 1927 Nobelpreis
- Zweite Bestätigung der Teilchennatur von Licht



[de.wikipedia.org/wiki/Compton-Effekt](https://de.wikipedia.org/wiki/Compton-Effekt)

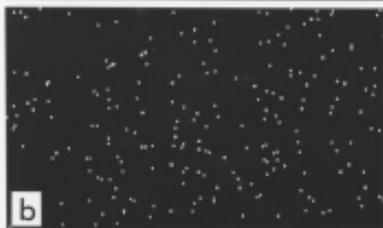


## Welle-Teilchen-Dualismus

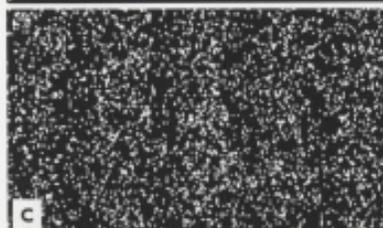
## Betrachte Doppelspaltexperiment mit Elektronen



(a) 11 Elektronen



(b) 200 Elektronen



(c) 6000 Elektronen



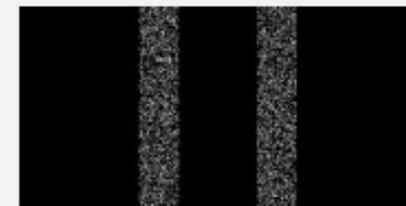
(d) 40000 Elektronen



(e) 140000 Elektronen



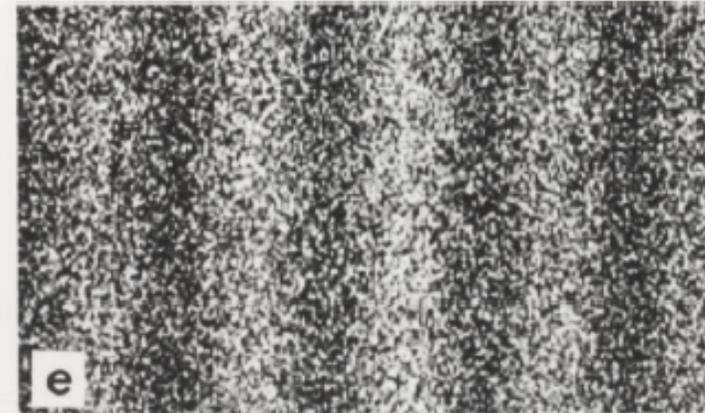
Klassische Welle



Klassische Teilchen

[de.wikipedia.org/wiki/Doppelspaltexperiment](https://de.wikipedia.org/wiki/Doppelspaltexperiment)

- Objekte verfügen gleichermaßen über die Eigenschaften von klassischen Wellen und klassischen Teilchen
- Quantenobjekte zeigen Intensitätsverteilung (⇒ **Welleneigenschaft**), andererseits ist der Intensitätsverlauf nicht kontinuierlich (⇒ **Teilcheneigenschaften**)





Abhängig vom Experiment besitzen  
Objekte mehr  
Teilchen- **oder** mehr Wellencharakter



- Das quantenmechanische System wird durch die Wellenfunktion  $\psi(\mathbf{x}, t)$  beschrieben
- System nicht direkt messbar und ist keine Welle oder kein Teilchen im klassischen Sinne
- Die „Bewegungen“ in einem Experiment werden durch Wellenfunktionen beschrieben, d.h. zeitliche Entwicklung über Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{x}, t)$$

- Das Betragsquadrat liefert die Wahrscheinlichkeit, bei einem Experiment ein Ergebnis zu messen
- Messung führt zum Kollaps der Wellenfunktion und es bleibt nur ein einzelnes „teilchenähnliches“ Ergebnis übrig

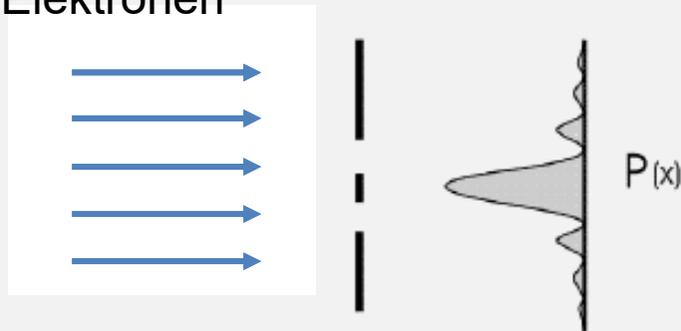


## Folgen: Aufgabe klassischer Vorstellungen

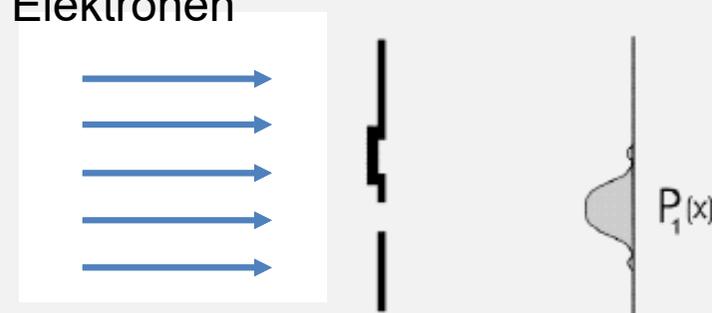
- Ergebnisse von Einzelexperimenten sind nicht mehr vorhersehbar
- Nur statistische Aussagen für viele Wiederholungen möglich
- Wellenfunktion ist nur eine Möglichkeit für die Beschreibung quantenmechanischer Objekte, aber keine Tatsache
- Jede Messung / Beobachtung beeinflusst das Objekt und ist nicht vermeidbar

- Eine Messung beeinflusst immer das Ergebnis
- Messmethode legt fest, ob mehr Teilchen- oder mehr Welleneigenschaften beobachtet werden können

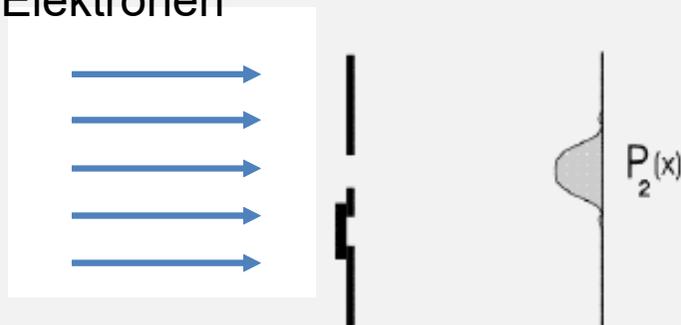
(a) Elektronen



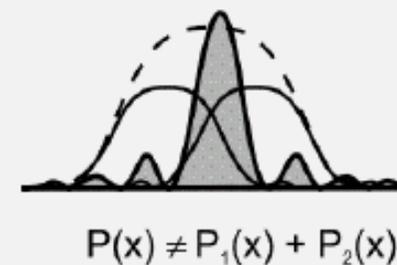
(b) Elektronen



(c) Elektronen



(d)



[http://www.milq-physik.de/5.\\_Elektronen](http://www.milq-physik.de/5._Elektronen)



Wenn Wellen Teilcheneigenschaften besitzen,  
besitzen dann klassische Teilchen auch  
Welleneigenschaften?

de Broglie, 1922: Wenn jeder Welle Teilchen mit einem Impuls und Energie zugeordnet werden können, so muss auch jedem Teilchen eine Welle mit bestimmter Wellenlänge zugeordnet werden können

- Photonen, Elektronen und Elementarteilchen
- Aber auch zusammengesetzte Teilchen:  
Atome und Moleküle

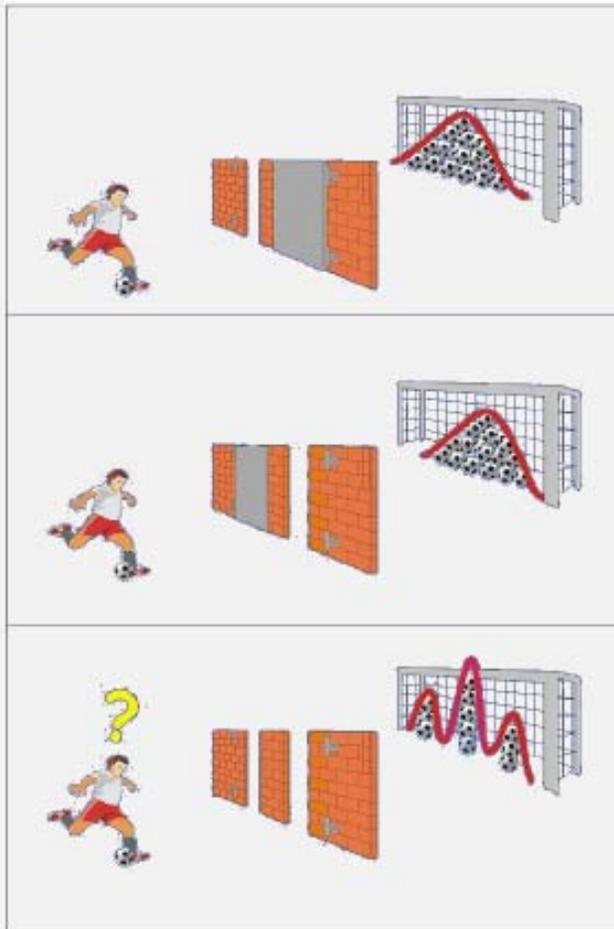


[de.wikipedia.org/wiki/Louis-Victor\\_de\\_Broglie](https://de.wikipedia.org/wiki/Louis-Victor_de_Broglie)

- Beschreibung quantenmechanischer Effekte von Materie (wie Streuung und Interferenz)
- De-Broglie-Wellenlänge:  $\lambda = \frac{h}{p}$  mit  $p = \frac{m \cdot v}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}$
- D.h. die Wellenlänge ist abhängig von Masse und Geschwindigkeit des Objekts → Interferenz- und Streueffekte sind nur bei sehr kleinen Objekten (z.B. Elektronen) einfach zu beobachten
  - z.B. Doppelspaltexperiment mit Elektronen



## Soccer with quantum balls



„Von den bizarren Phänomenen der Quantenwelt bleiben wir in unserem Alltag weitgehend verschont. Doch gibt es eine prinzipielle Grenze, die verhindert, dass wir etwa die Interferenz von Fußballen beobachten?“

W.P.Hirlinger

[www.quantenphysik-schule.de/fullerene.htm](http://www.quantenphysik-schule.de/fullerene.htm)

- Zeilinger und Arndt, 1999: Untersuchung von Interferenzphänomenen bei C<sub>60</sub>-Fullerene
- 60 Kohlenstoffatome mit Masse 720 u
- 360 Protonen, 360 Neutronen und 360 Elektronen bilden eine Fullerene
- ca. 1,5 nm groß

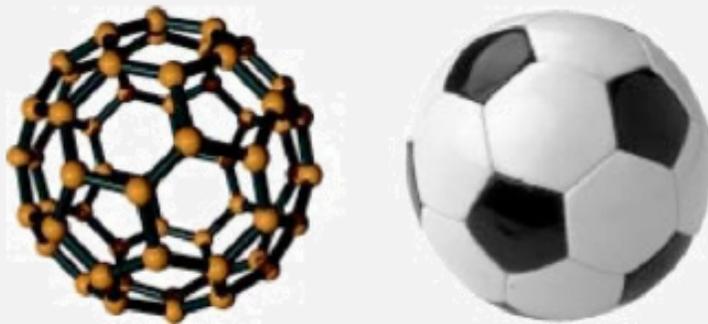
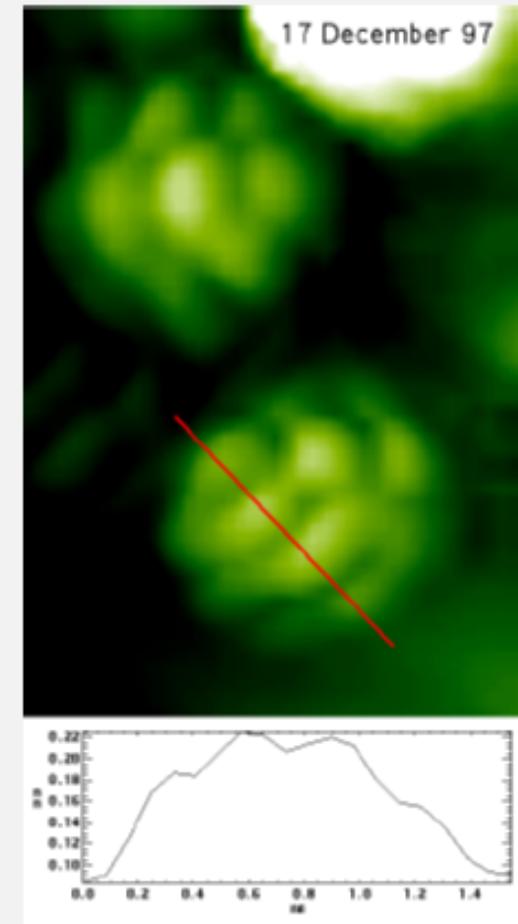
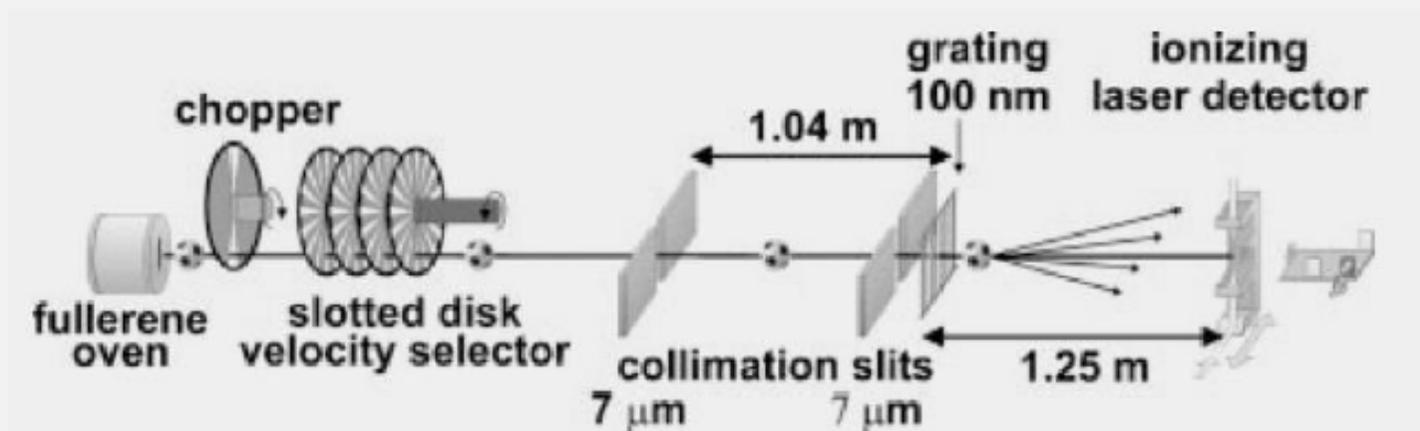


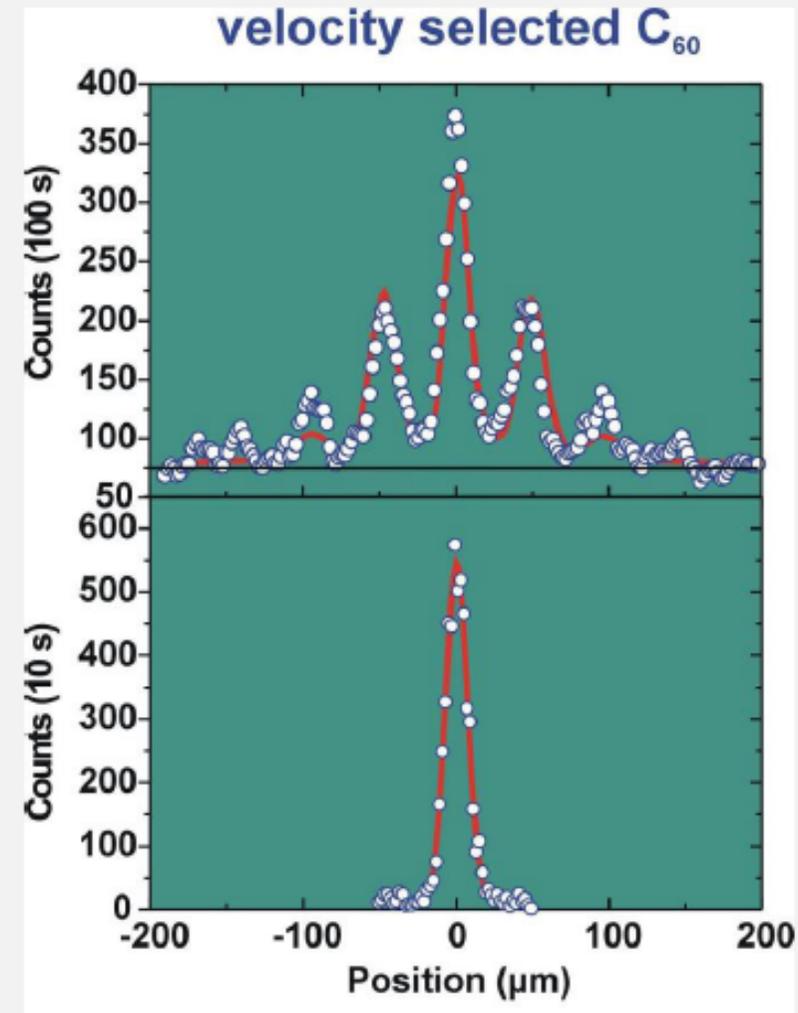
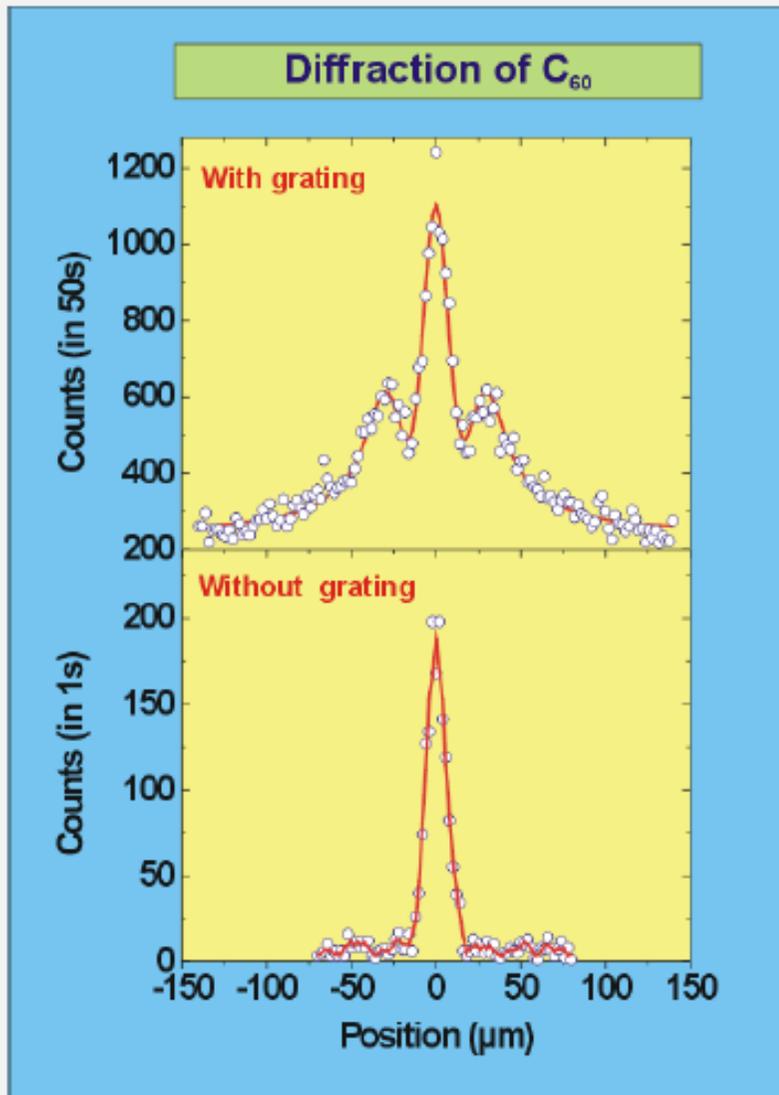
Fig. 2. The fullerene molecule C<sub>60</sub>, consisting of 60 carbon atoms arranged in a truncated icosahedral shape, is the smallest known natural soccer ball.



- Fulleren-Ofen:  $T=900-1000$  K; Maxwell-verteilte Geschwindigkeit mit eine Maximum bei 220 m/s  
→ Broglie-Wellenlänge von 2,5  $\mu\text{m}$
- Gitter: Freistehendes  $\text{SiN}_x$  Gitter mit 50 nm breiten Spalten, bei einer Gitterkonstanten von 100 nm
- Detektor: Hochfokussierte Laserstrahl zur Thermo-Photoionisation der Fullerene; die ionisierten Moleküle werden in einem elektrischen Feld beschleunigt und lösen beim Aufprall auf eine Metallplatte Elektronen aus



M. Arndt *et al.*, Nature **401**, 680 (1999)



M. Arndt *et al.*, Nature **401**, 680 (1999)



Der Wellencharakter ist bei makroskopischen Objekten nicht sichtbar

- Selbst bei langsamen Bewegungen besitzen makroskopische Objekte eine sehr kleine Wellenlänge, die kleiner als die Abmessung des Objektes selbst ist
  - Gegenstand ist selbst nicht mehr ein Quantenobjekt
- In makroskopischen Objekten spielen sich thermodynamisch irreversible Prozesse ab und es kommt zu Photonenaustausch mit der Umgebung
  - Dekohärenz des Systems (interferenzfähiger Zustand wandelt sich schnell in einen nicht interferenzfähigen Zustand)
  - zeigt klassisches Teilchenverhalten



## 2.4 Axiome der Quantenmechanik



**Axiom 1.1 (Vektoren im Hilbertraum)** *Die Quantenmechanik wird durch Vektoren  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  in einem (unendlich-dimensionalen) Funktionen-Raum  $\mathcal{H}$  beschrieben. Alle Elemente dieses Raumes sind quadratintegrabel (Hilbert-Raum) und normierbar ( $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ ). Ein Zustandsraum ist ein Unterraum von  $\mathcal{H}$ , auf dem die für ein System relevanten Zustandsvektoren leben.*



**Axiom 1.2 (Observablen und Operatoren)** *Jede physikalische Observable  $A$  wird durch einen hermite'schen Operator  $\hat{A}$  beschrieben, der im Hilbertraum  $\mathcal{H}$  wirkt. Dessen Eigenwerte sind (aufgrund der Hermitizität von  $\hat{A}$ ) reell.*



**Axiom 1.3 (Messprozess und Eigenwerte)** *Jede Messung einer Observablen  $A$  kann nur einen Eigenwert des zugeordneten Operators  $\hat{A}$  liefern.*



**Axiom 1.4 (Messung und Wahrscheinlichkeit)** Sei  $\mathcal{A}$  eine Observable und  $a_i, |a_i\rangle$  die Eigenwerte und Eigenvektoren zum zugeordneten Operator  $\hat{A}$ . Wird dann  $\mathcal{A}$  eines normierten Zustandes  $|\psi\rangle$  gemessen, so ist die Wahrscheinlichkeit  $\mathbb{P}(a_i)$ , den Eigenwert  $a_i$  zu messen:

$$\mathbb{P}(a_i) = |\langle a_i | \psi \rangle|^2 \quad (1.0.1)$$

Ist der Eigenwert  $a_i$   $g_i$ -fach entartet, so gilt mit den Eigenvektoren  $|a_i^k\rangle$ ,  $k = 1, \dots, g_i$ :

$$\mathbb{P}(a_i) = \sum_{k=1}^{g_i} |\langle a_i^k | \psi \rangle|^2 \quad (1.0.2)$$

Für ein kontinuierliches, nicht-entartetes Spektrum gilt: Die Wahrscheinlichkeit das System im Intervall  $[\alpha, \alpha + d\alpha]$  anzutreffen ist:

$$d\mathbb{P}(\alpha) = \langle \alpha | \psi \rangle d\alpha \quad (1.0.3)$$



**Axiom 1.5 (Kollaps der Wellenfunktion/nicht-wechselwirkungsfreie Messung)** *Nach einer Messung des Zustandes  $|\psi\rangle$ , die  $a$  als nicht-entarteten Eigenwert (Eigenvektor:  $|a\rangle$ ) ergab befindet sich das System im Zustand  $|a\rangle$ . Ist der Eigenwert  $a$  entartet, so befindet sich das System in einem Zustandes des zu  $a$  gehörenden Eigenraumes.*



**Axiom 1.6 (zeitliche Entwicklung des Systems)** *Ein System sei durch den Hamilton-Operator  $\hat{H}$  beschrieben. Dann wird seine zeitliche Entwicklung durch die folgende Differentialgleichung beschrieben:*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.0.4)$$



**Axiom 1.7 (Korrespondenzprinzip)** Sei  $\mathcal{A}(\vec{r}, \vec{p})$  eine in der klassischen Mechanik bereits definierte Observable. Dann lässt sich der ihr zugeordnete Operator  $\hat{A}$  konstruieren, wenn man folgende Ersetzungen durchführt:

1. Der Ortsvektor  $\vec{r}$  wird durch den Ortsoperator  $\hat{R}$  ersetzt.
2. Der Impulsvektor  $\vec{p}$  wird durch den Impulsoperator  $\hat{P}$  ersetzt.
3. Aus einer Phasenraumintegration wird eine Spurbildung.



**Woher kommen diese Axiome?** Aus historischer Sicht hat sich die Quantenmechanik natürlich nicht aus diesen Axiomen, sondern aus experimentellen Erkenntnissen entwickelt. Bei der Vermessung von Emissionsspektren der Sonne durch Fraunhofer traten diskrete Linien aus, die mit einer klassischen Theorie nicht zu erklären waren. Später wurde gezeigt, dass diese Linien durch Übergänge zwischen diskreten Energieniveaus in Atomen erzeugt werden. Als erste Forderung an eine neue Theorie kann man also die Möglichkeit quantisierter Größen angeben. Dies ist in klassischen Theorien meist nur durch Postulate möglich, die Quantisierung ergibt sich nicht aus der Theorie. In der Quantenmechanik ist dies anders. Als weiterer wichtiger Hinweis auf die Struktur der neuen Theorie kann das Doppelspaltexperiment für Elektronen betrachtet werden. Es zeigt sich, dass auch für massebehaftete Teilchen eine Welleneigenschaft auftritt. Dies deutet auf eine lineare Struktur der Theorie hin. Die Struktur der Schrödingergleichung lässt sich etwa aus Rechnungen der klassischen Elektrodynamik für massebehaftete Austauscheteilchen motivieren.

- # Schwarzer Strahler
- # Emissionsspektren der Sonne (Fraunhofer)
- # Doppelspaltexperiment für Elektronen



Grenzen der klassischen Physik



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit.