Quantenmechanik – maximaler Nutzen bei minimalem Aufwand

G. Job

Job-Stiftung
c/o. Institut für Physikalische Chemie, Universität Hamburg

Lehrerfortbildung

Speyer Juni 2013

Gliederung

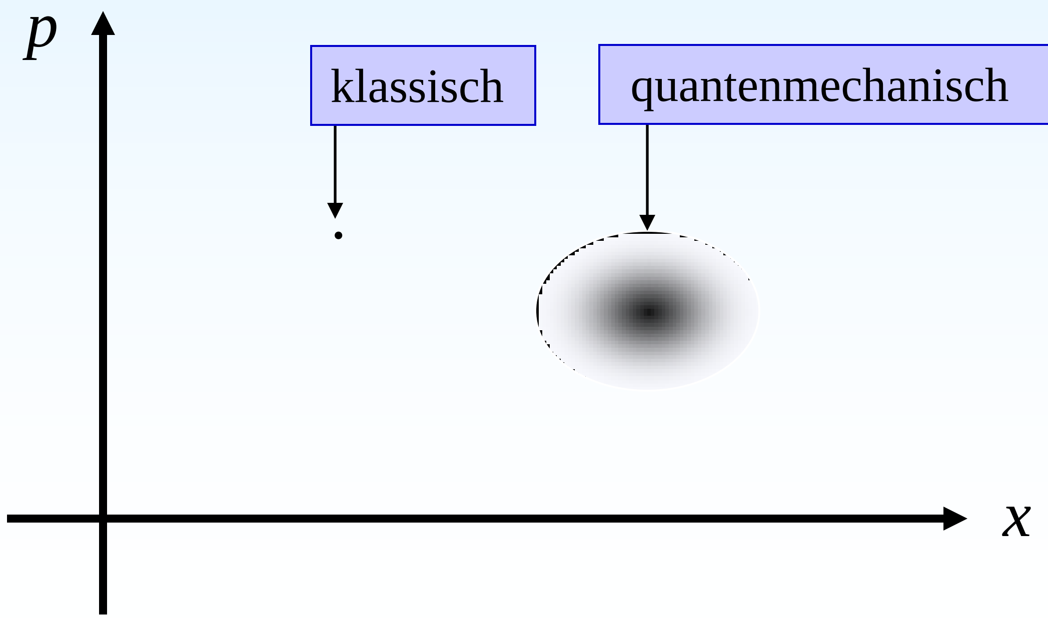
- Der Ansatz
- Stationäre Zustände
- Energiespektren
- Zustandssummen
- Ausblick

Der Ansatz

Den Bewegungszustand eines „Massenpunktes" pflegt man durch Angabe des Ortes x und des Impulses p zu kennzeichnen.

Im Phasenraum, in dem x und p als Koordinaten gewählt sind, entspricht jedem Bewegungszustand aus klassischer Sicht ein Punkt, aus quantenmechanischer Sicht dagegen ein Fleck mit der Fläche h.

Vereinfachend kann man diesen Fleck als kleines Rechteck mit den Kantenlängen Δx und Δp und dem Inhalt $\Delta x \cdot \Delta p = h$ darstellen.

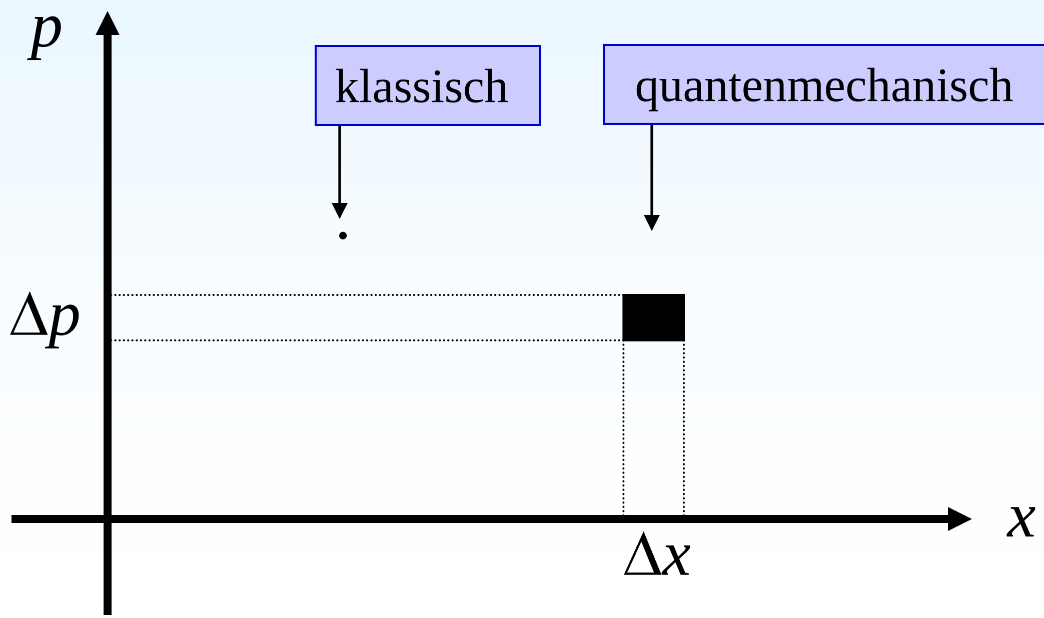


Der Ansatz

Den Bewegungszustand eines „Massenpunktes“ pflegt man durch Angabe des Ortes x und des Impulses p zu kennzeichnen.

Im Phasenraum, in dem x und p als Koordinaten gewählt sind, entspricht jedem Bewegungszustand aus klassischer Sicht ein Punkt, aus quantenmechanischer Sicht dagegen ein Fleck mit der Fläche h.

Vereinfachend kann man diesen Fleck als kleines Rechteck mit den Kantenlängen Δx und Δp und dem Inhalt $\Delta x \cdot \Delta p = h$ darstellen.

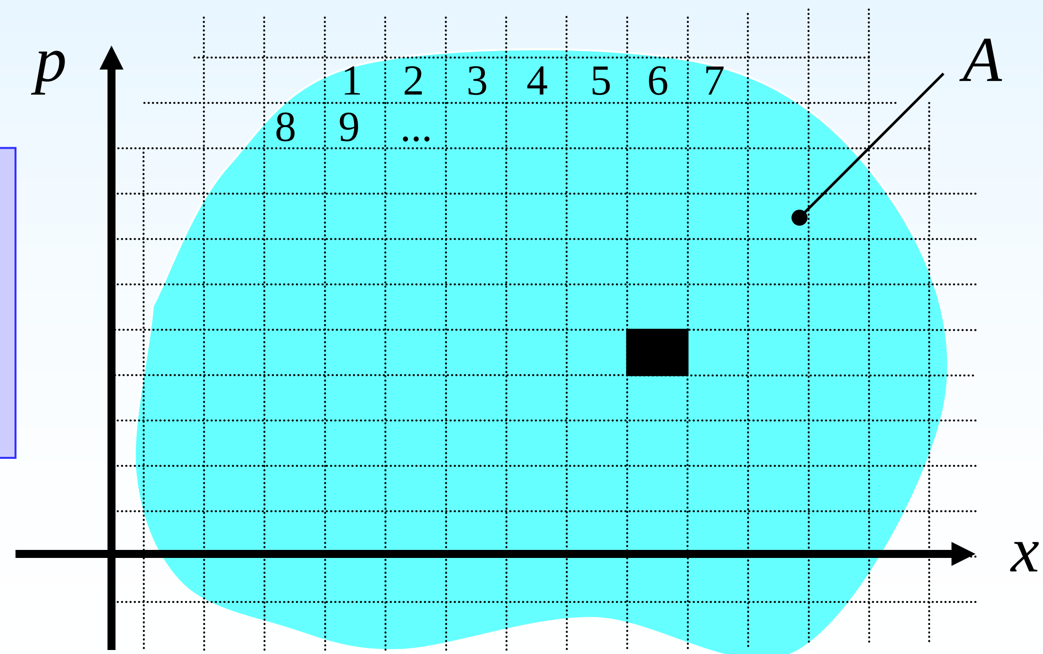


Der Ansatz

Den Bewegungszustand eines „Massenpunktes“ pflegt man durch Angabe des Ortes x und des Impulses p zu kennzeichnen.

Im Phasenraum, in dem x und p als Koordinaten gewählt sind, entspricht jedem Bewegungszustand aus klassischer Sicht ein Punkt, aus quantenmechanischer Sicht dagegen ein Fleck mit der Fläche h.

Auf einen Bereich des Phasenraums mit der Fläche A passen ohne Überlappung $\zeta \approx A/h$ Flecken, was $\zeta \approx A/h$ unabhängigen Zuständen entspricht.

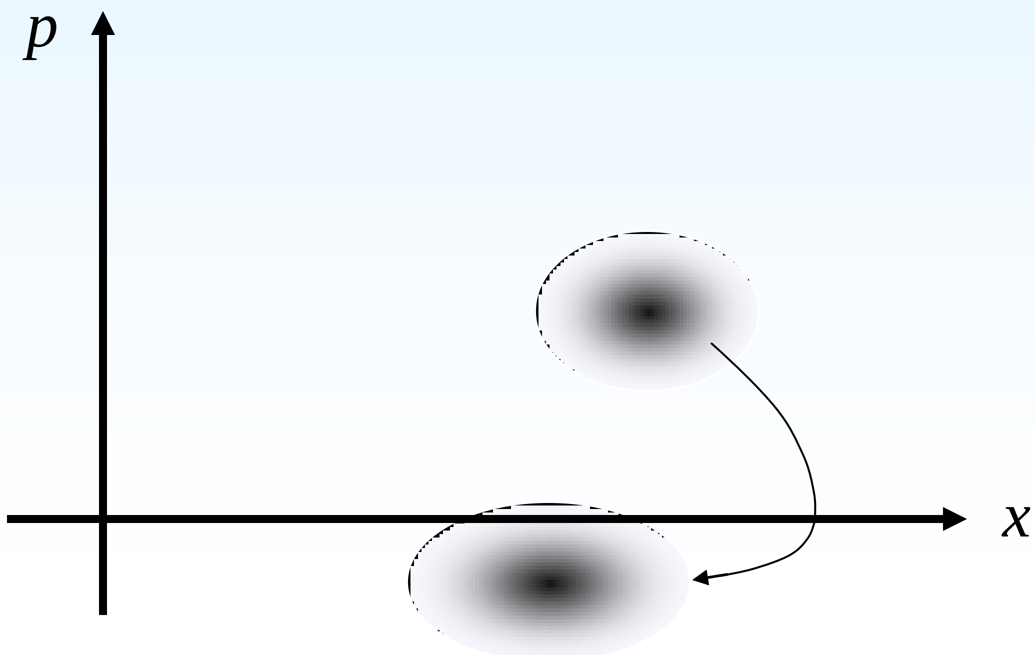


Der Ansatz

Die Flecken ruhen nicht, sondern wandern und verzerren sich. Lage und Gestalt der Flecken sind variabel und je nach verfolgtem Zweck verschieden wählbar, aber ihr Inhalt unveränderlich.

Dieser Ansatz erlaubt eine Reihe bemerkenswerter Folgerungen. Wir wählen hier einige Beispiele aus verschiedenen Bereichen:

1. Stationäre Zustände
2. Energiespektren
3. Zustandssummen

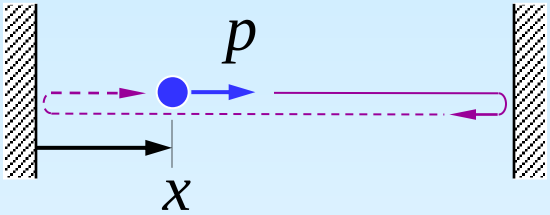


Gliederung

- ✓ Der Ansatz
- **Stationäre Zustände**
- Energiespektren
- Zustandssummen
- Ausblick

Stationäre Zustände: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge *a*, Teilchenmasse *m*



Vorausgesetzt wird selbstredend: Stoß auf die Wände elastisch, Bewegung reibungsfrei ...

Bewegung durch Ort x und Impuls p gekennzeichnet

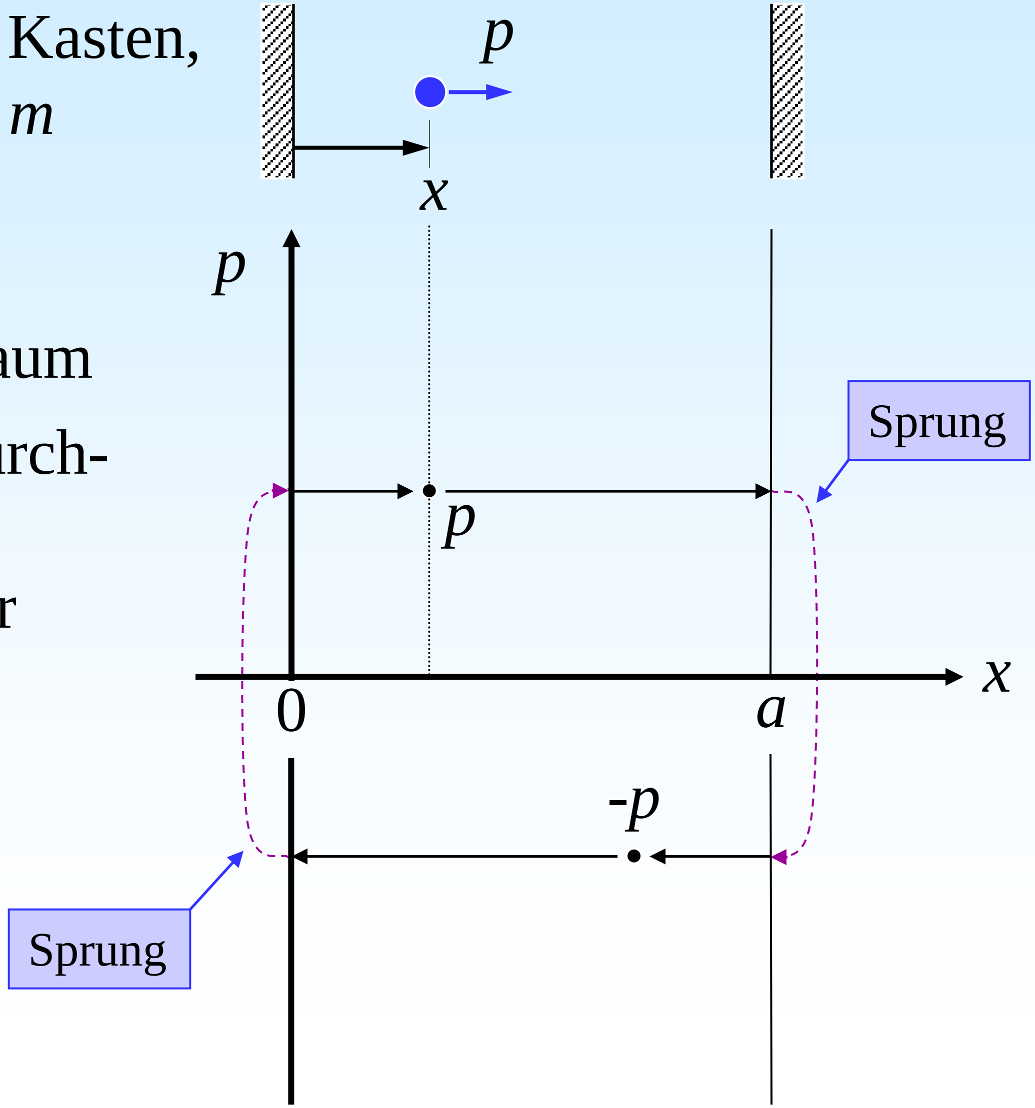
Das Teilchen pendelt zwischen linker und rechter Wand.

Energie $$E = \frac{p^2}{2m}$$

Kinetische Energie E = ½mv^2, ausgedrückt durch Impuls $p = mv$ statt Geschwindigkeit v.

Stationäre Zustände: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten, Kastenlänge a, Teilchenmasse m

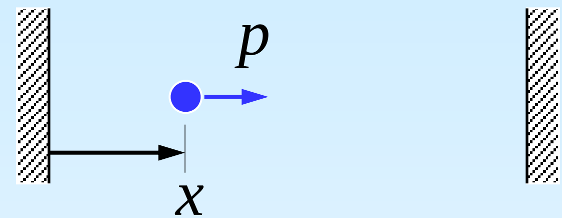


Bewegungsablauf im Phasenraum

1. klassisch: Phasenpunkt durchläuft eine Rechteckschleife längs einer Linie konstanter Energie E

Stationäre Zustände: Translation

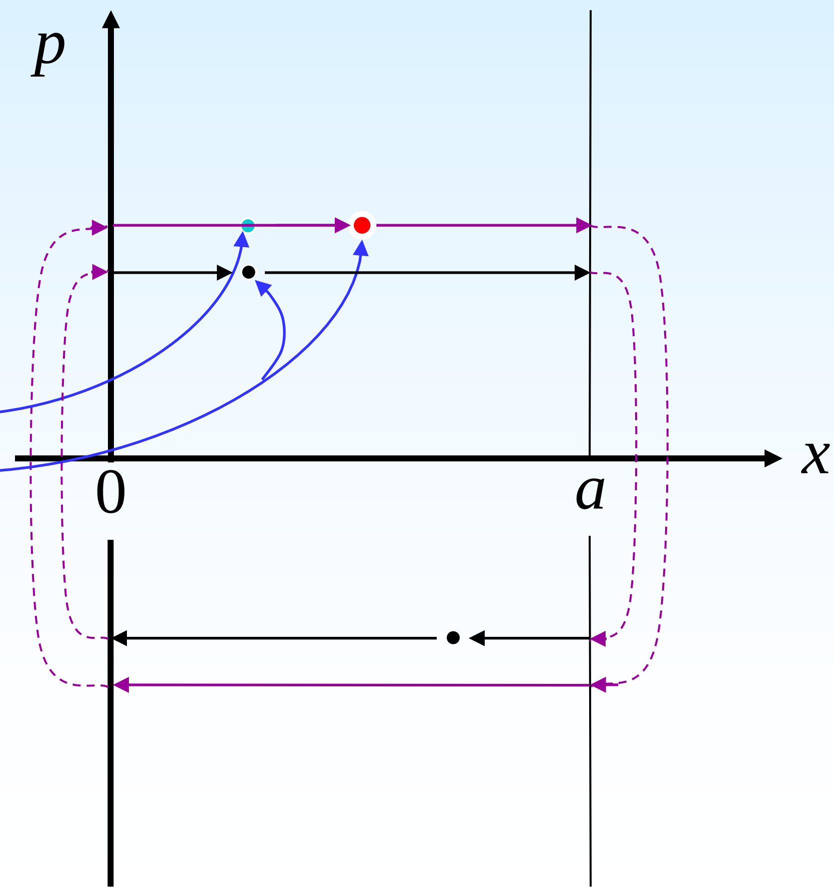
Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge a, Teilchenmasse m



Bewegungsablauf im Phasenraum

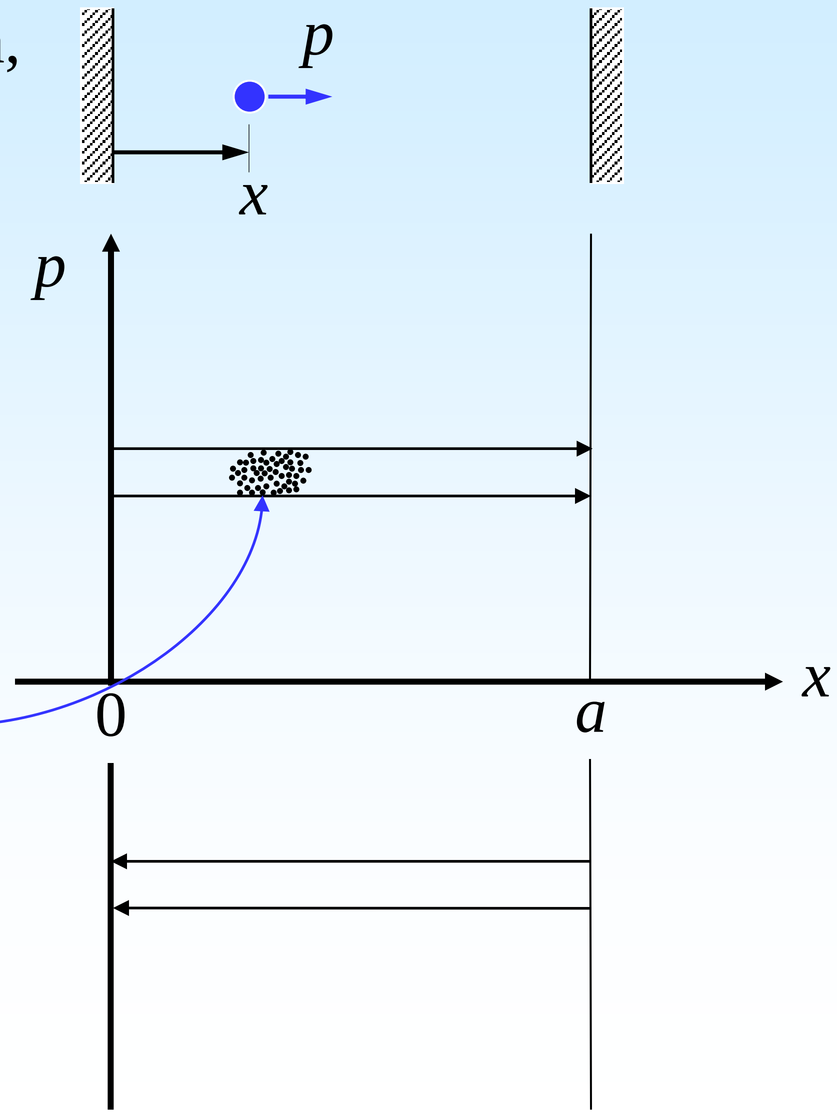
1. klassisch: Phasenpunkt durchläuft eine Rechteckschleife

> Je größer der Impuls ...
> ... desto weiter eilt ein Phasenpunkt einem anderen voraus.



Stationäre Zustände: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge *a*, Teilchenmasse *m*



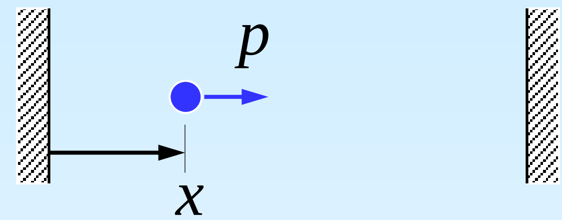
Bewegungsablauf im Phasenraum

1. klassisch: Phasenpunkt durchläuft eine Rechteckschleife

Ein Schwarm von Phasenpunkten wird bei jedem Umlauf weiter geschert und im Laufe der Zeit schließlich zu zwei Streifen ober- und unterhalb der x-Achse verschmiert.

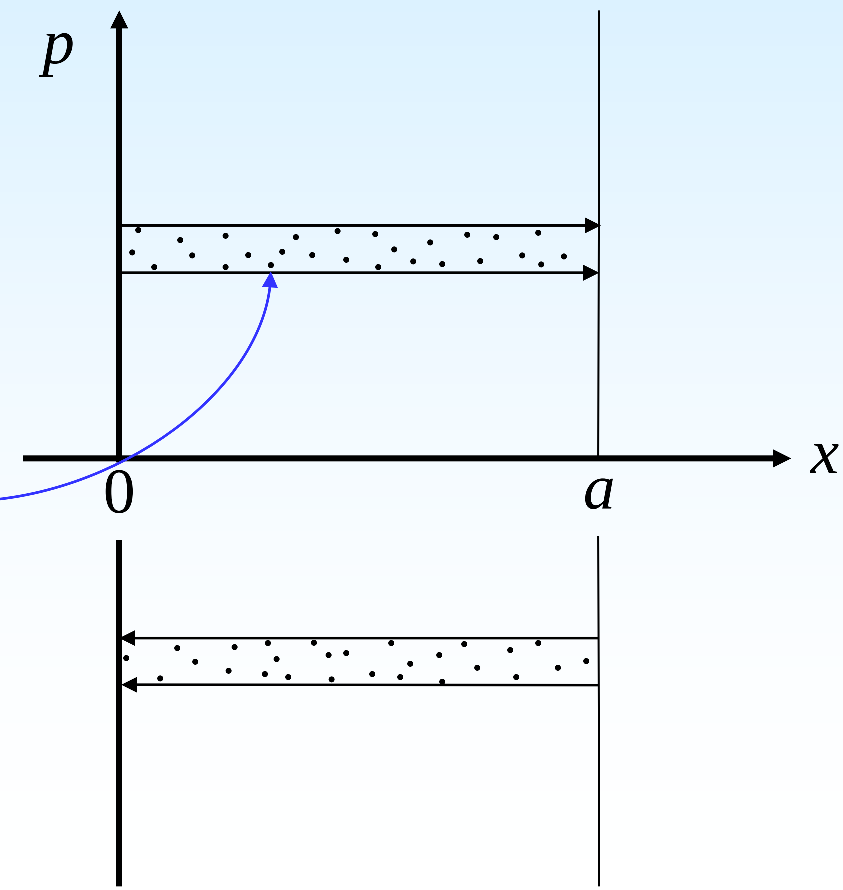
Stationäre Zustände: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge a, Teilchenmasse m



Bewegungsablauf im Phasenraum

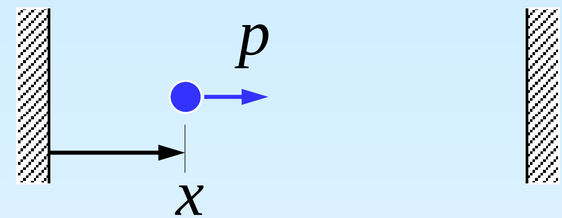
1. klassisch: Phasenpunkt durchläuft eine Rechteckschleife



Ein Schwarm von Phasenpunkten wird bei jedem Umlauf weiter geschert und im Laufe der Zeit schließlich zu zwei Streifen ober- und unterhalb der x-Achse verschmiert.

Stationäre Zustände: Translation

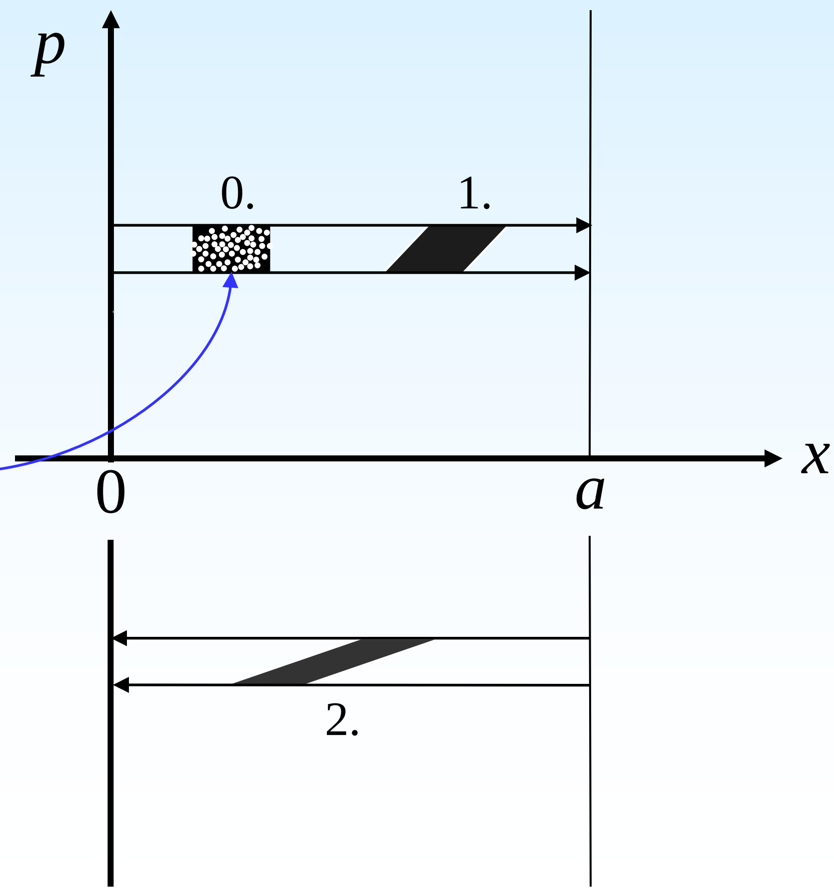
Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge a, Teilchenmasse m



Bewegungsablauf im Phasenraum

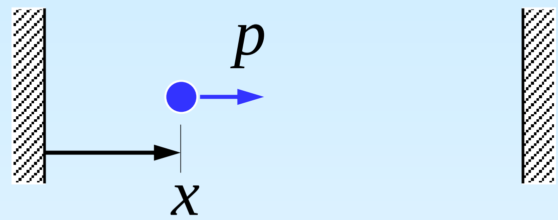
2. quantentheoretisch: Phasen-fleck wandert und zerläuft.

Wie? Einen Eindruck davon gewinnt man, wenn man den Fleck durch einen Schwarm klassischer Phasenpunkte annähert.



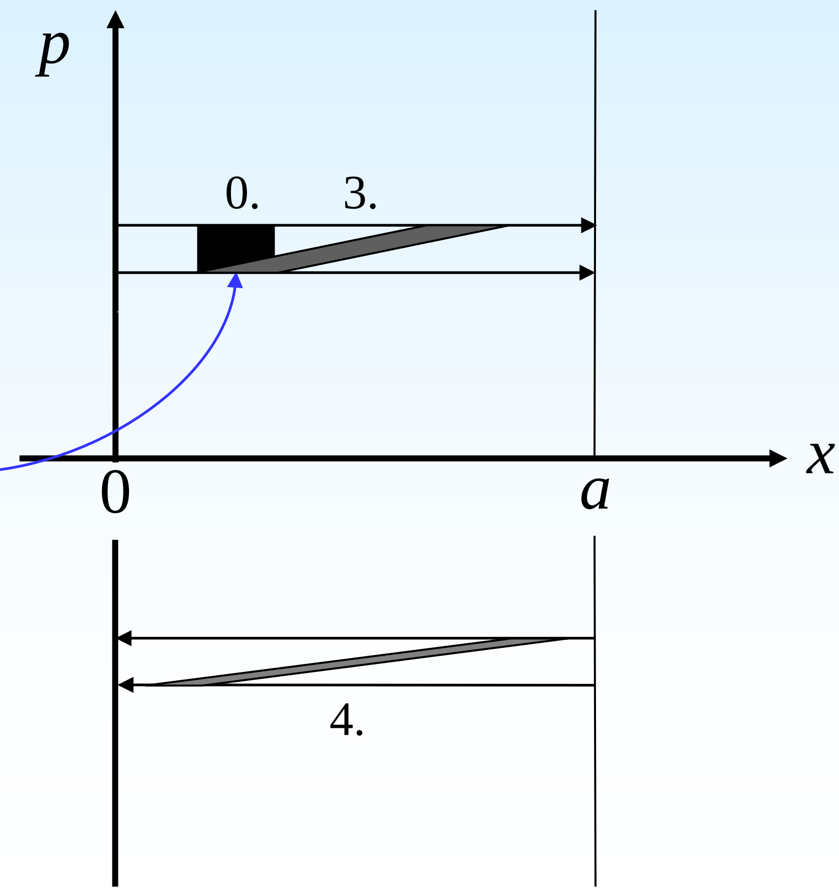
Stationäre Zustände: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge a, Teilchenmasse m



Bewegungsablauf im Phasenraum

2. quantentheoretisch: Phasenfleck wandert und zerläuft.

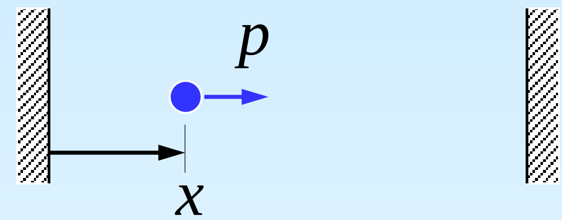


Wie? Einen Eindruck davon gewinnt man, wenn man den Fleck durch einen Schwarm klassischer Phasenpunkte annähert.

Der Fleck wird zu einem immer längeren, immer dünneren, vielfach zerstückelten und gefalteten Strich auseinander gezogen.

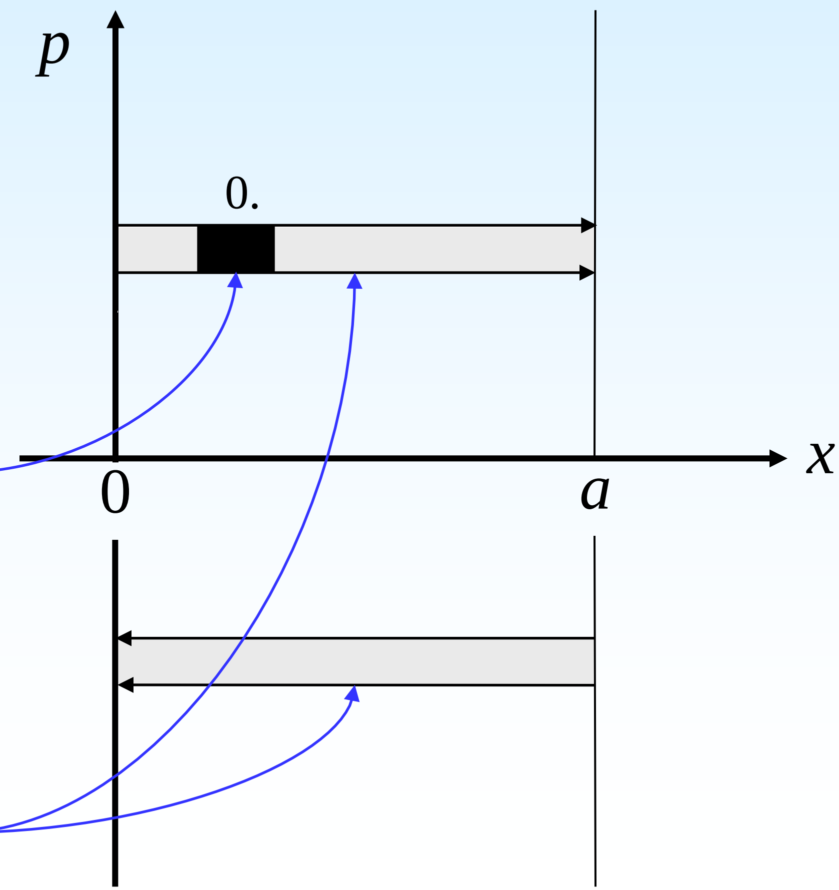
Stationäre Zustände: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge *a*, Teilchenmasse *m*



Bewegungsablauf im Phasenraum

2. quantentheoretisch: Phasenfleck wandert und zerläuft.



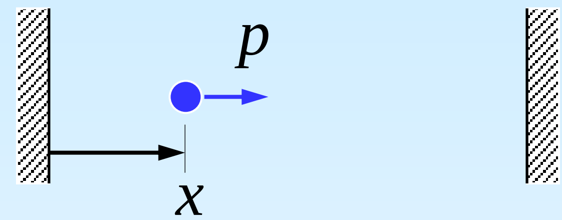
Wie? Einen Eindruck davon gewinnt man, wenn man den Fleck durch einen Schwarm klassischer Phasenpunkte annähert.

Der Fleck wird zu einem immer längeren, immer dünneren, vielfach zerstückelten und gefalteten Strich auseinander gezogen.

Endergebnis: blassgrauer Doppelstreifen

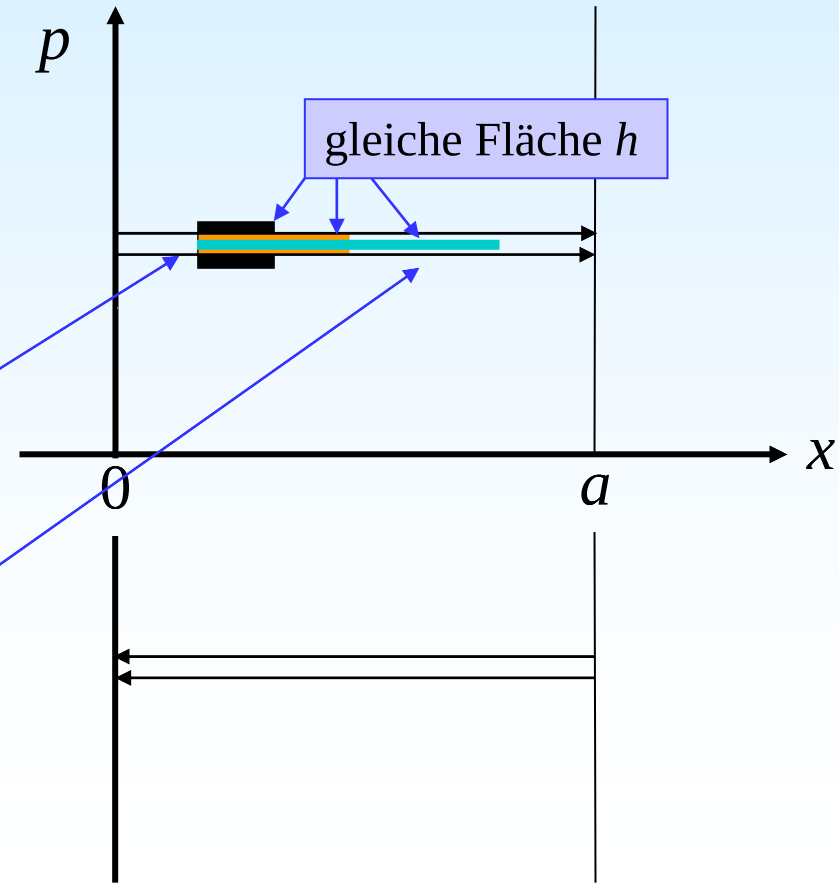
Stationäre Zustände: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten, Kastenlänge a, Teilchenmasse m



Bewegungsablauf im Phasenraum

2. quantentheoretisch: Phasenfleck wandert und zerläuft.

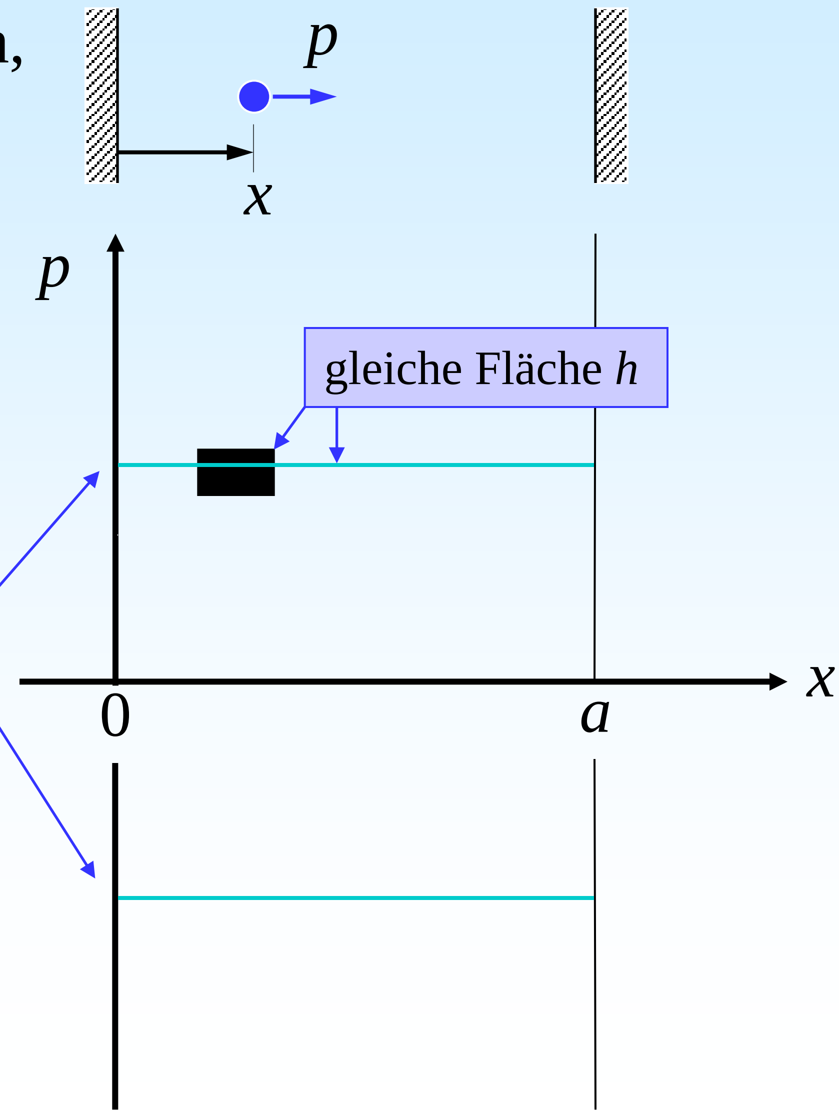


Ein anfangs halb so breiter, aber doppelt so langer Fleck liefert am Ende einen schmäleren Doppelstreifen.

Je länger und dünner der Fleck, desto schärfer der Impuls, desto bestimmter die Energie.

Stationäre Zustände: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge *a*, Teilchenmasse *m*



Bewegungsablauf im Phasenraum

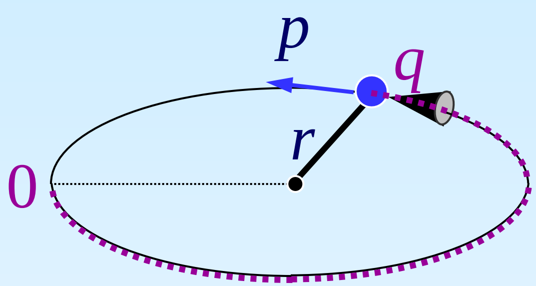
2. quantentheoretisch: Phasenfleck wandert und zerläuft.

Ein Fleck maximaler Länge 2*a* stimmt mit dem zugehörigen Doppelstreifen überein! Der Fleck lässt keine Bewegung erkennen – er ist stationär!
Die Energieunschärfe ΔE ist minimal!

Stationäre Zustände (Dauer $\Delta t = \infty$) haben bekanntlich scharfe Energien ($\Delta E = 0$). Das liefert unser Ansatz nicht, aber fast.

Stationäre Zustände: Rotation

Teilchen auf einer Kreisbahn
Umfang $2\pi r$, Teilchenmasse m



Vorausgesetzt wird wieder Reibungs-freiheit ...

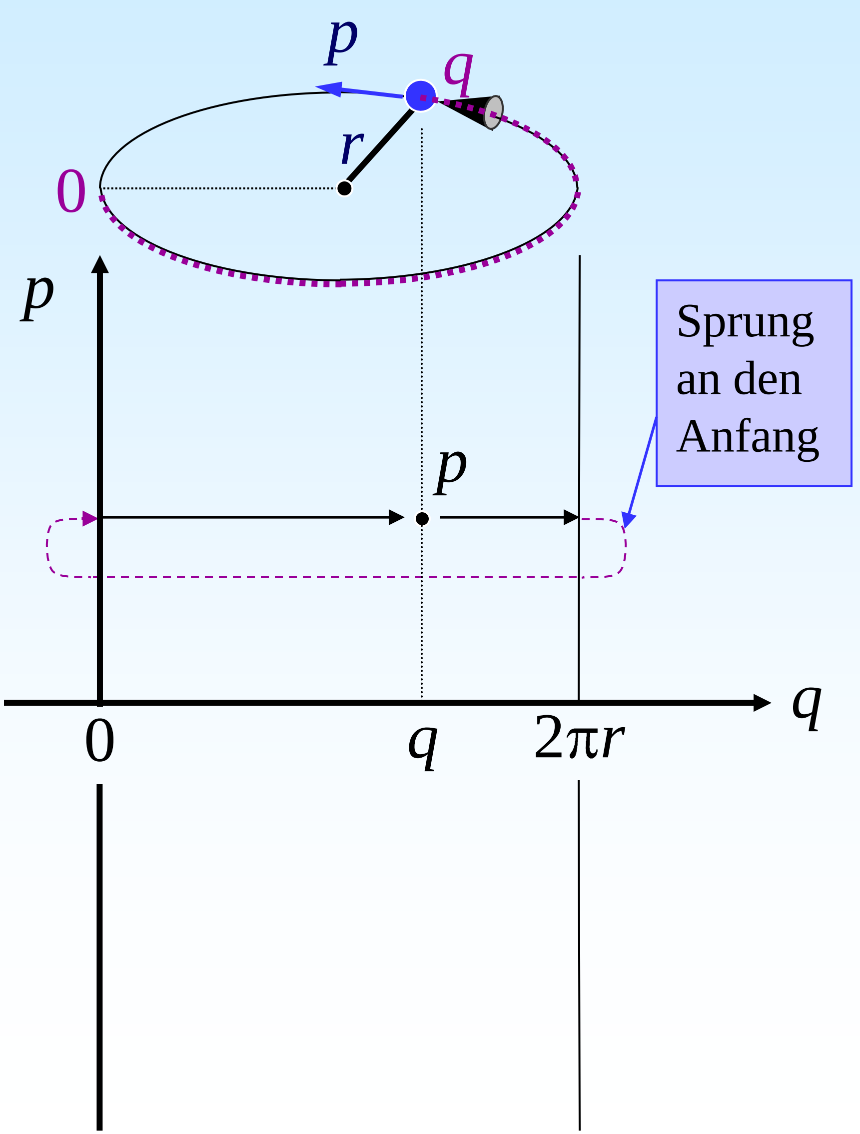
Bewegung durch Ort q auf dem Umfang und tangentialer Impuls-komponente p gekennzeichnet

Das Teilchen kann mit positivem oder negativem Drehsinn umlaufen.

Energie $E = \dfrac{p^2}{2m}$

Stationäre Zustände: Rotation

Teilchen auf einer Kreisbahn
Umfang $2\pi r$, Teilchenmasse m

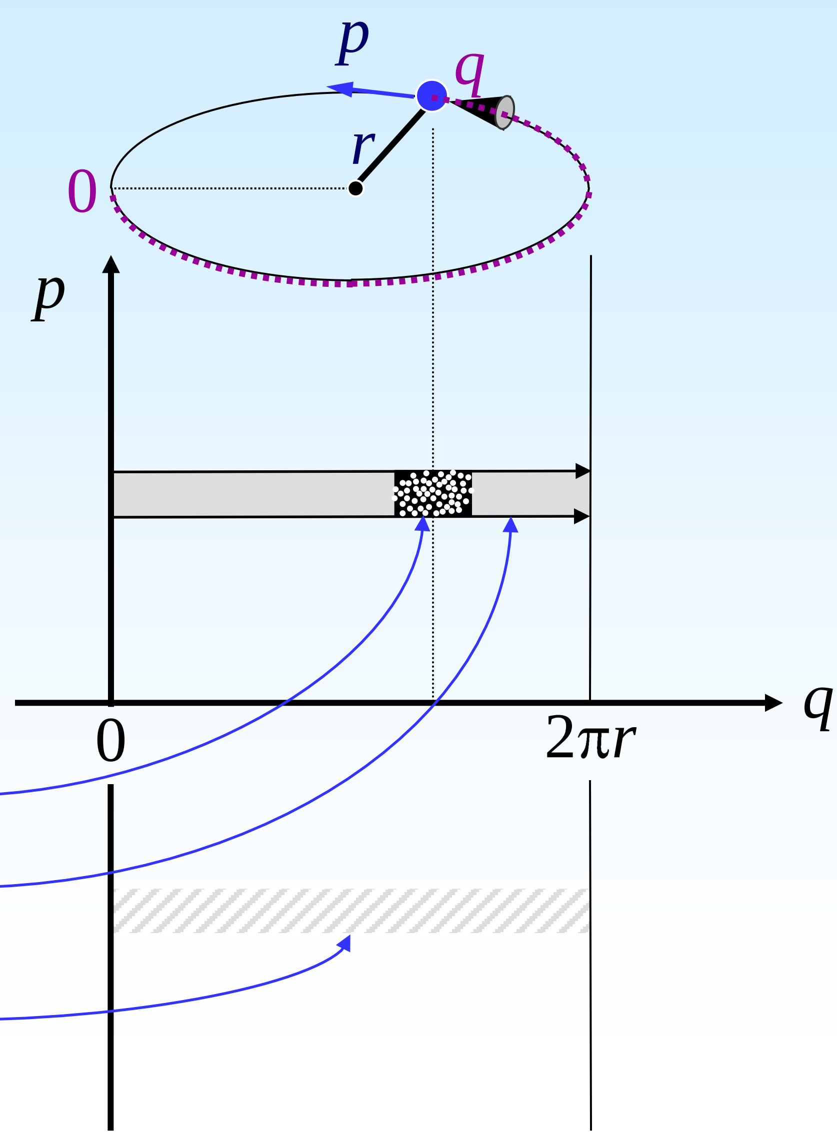


Bewegungsablauf im Phasenraum

1. klassisch: Phasenpunkt durchläuft periodisch eine Strecke längs einer Linie konstanter Energie E

Stationäre Zustände: Rotation

Teilchen auf einer Kreisbahn
Umfang $2\pi r$, Teilchenmasse m



Bewegungsablauf im Phasenraum

2. quantentheoretisch: Phasenfleck wandert und zerläuft.

Einen Eindruck davon gewinnt man, wenn man den Fleck wieder durch einen Schwarm klassischer Phasenpunkte annähert.

Ergebnis: blassgrauer Streifen

Für ein im Gegensinn umlaufendes Teilchen erhielte man einen entsprechenden Streifen unterhalb der q-Achse.

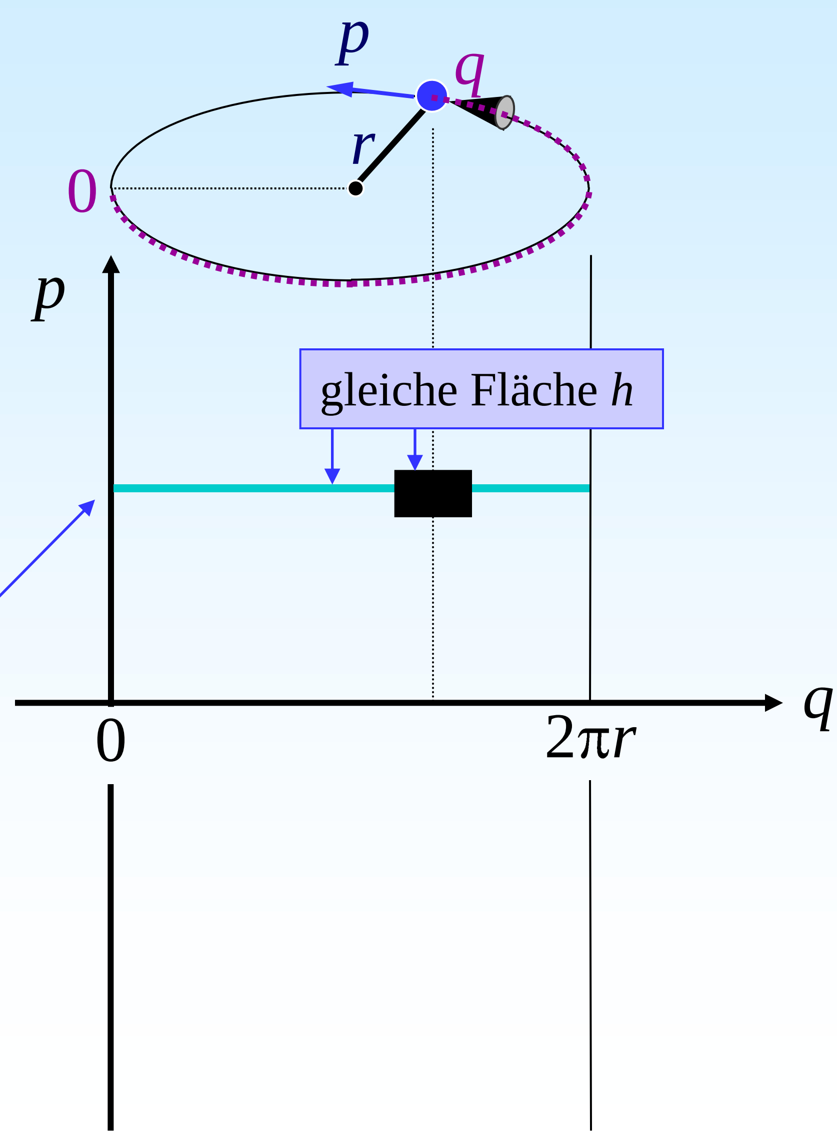
Stationäre Zustände: Rotation

Teilchen auf einer Kreisbahn
Umfang $2\pi r$, Teilchenmasse m

Bewegungsablauf im Phasenraum

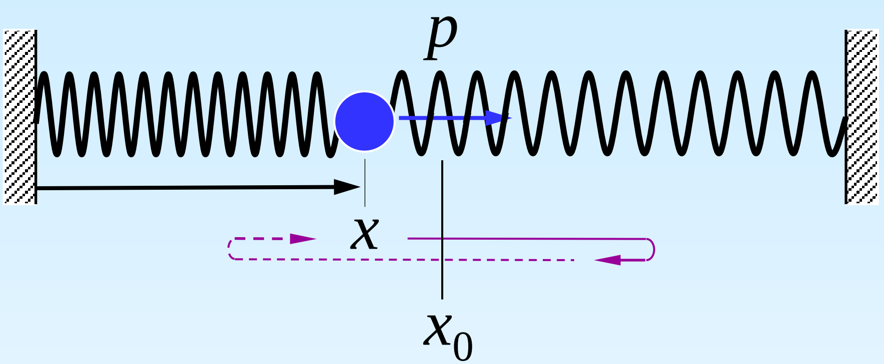
2. quantentheoretisch: Phasen-fleck wandert und zerläuft.

   Ein Fleck maximaler Länge $2\pi r$ ist dagegen stationär, die Energieunschärfe ΔE minimal!



Stationäre Zustände: Schwingung

Teilchen federnd aufgehängt,
Federsteife D, Teilchenmasse m



Vorausgesetzt wird wieder Reibungsfreiheit ...

Bewegung durch Ort x und Impuls p beschrieben

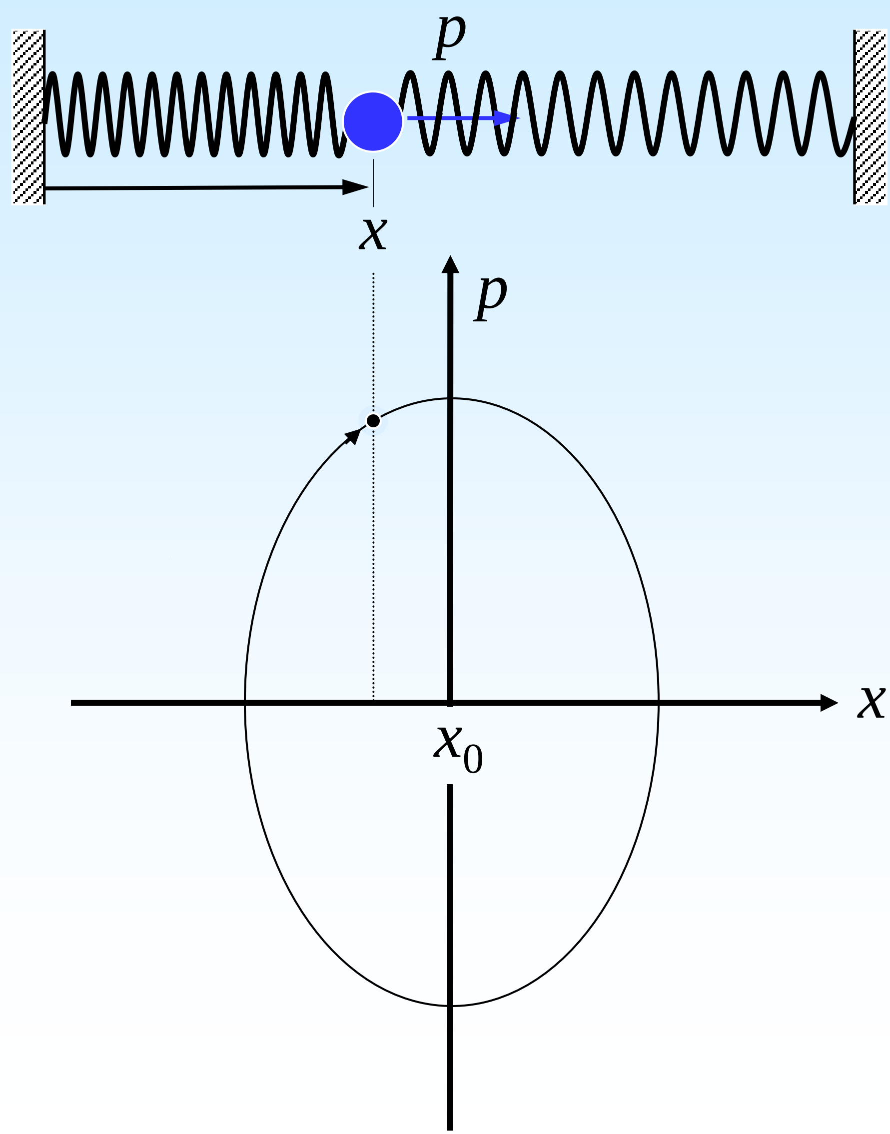
Das Teilchen schwingt symmetrisch um seine Ruhelage x_0

Energie $$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} D x^2$$

Summe aus kinetischer und potentieller Energie

Stationäre Zustände: Schwingung

Teilchen federnd aufgehängt,
Federsteife *D*, Teilchenmasse *m*

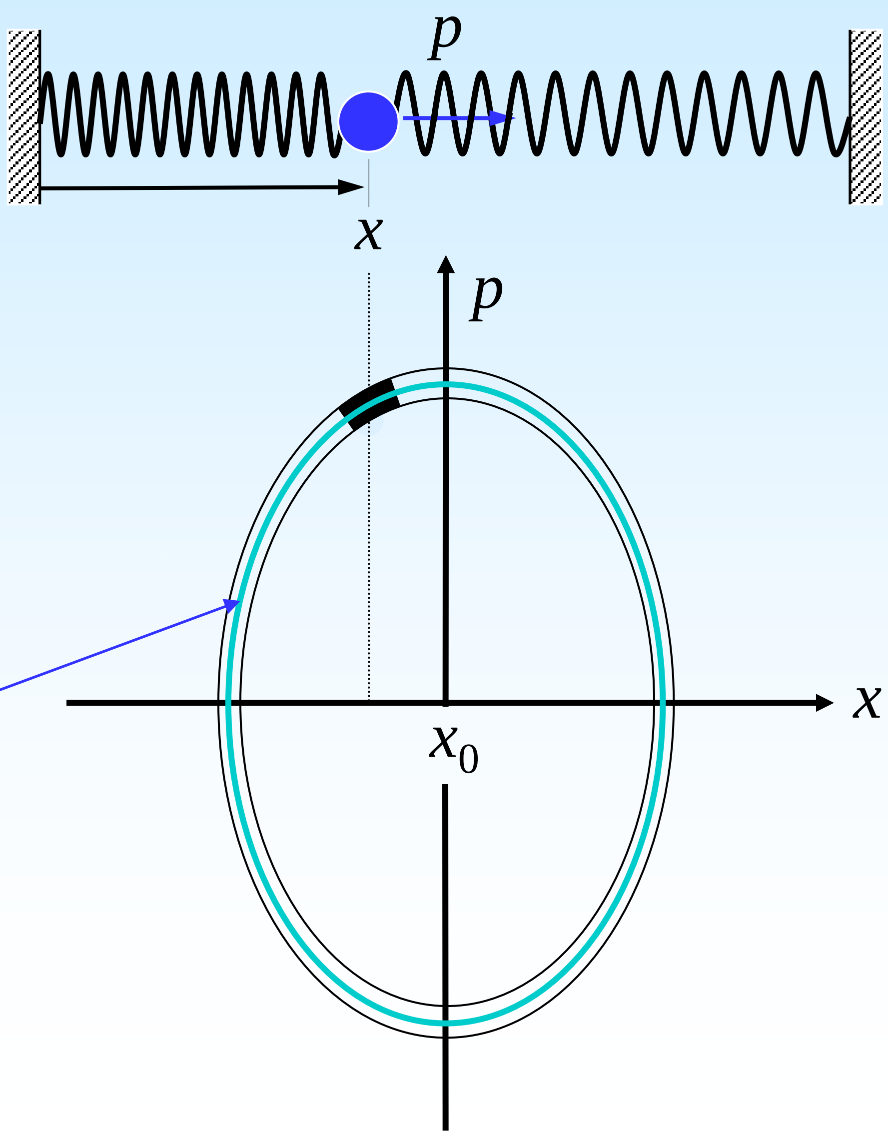


Bewegungsablauf im Phasenraum

1. klassisch: Phasenpunkt, der eine Ellipse durchläuft

Stationäre Zustände: Schwingung

Teilchen federnd aufgehängt,
Federsteife D, Teilchenmasse m



Bewegungsablauf im Phasenraum

2. quantentheoretisch: umlaufen-der Phasenfleck

Ein Fleck minimaler Breite
(d. h. mit minimalem ΔE)
lässt keine Bewegung erkennen,
er ist stationär!

Gliederung

- ✓ Der Ansatz
- ✓ **Stationäre Zustände**
- **Energiespektren**
- Zustandssummen
- Ausblick

Energiespektren

Gesucht sind die Energien der stationären Zustände eines Systems.

Grundgedanke:

Wenn die Anzahl der Zustände $\zeta(E)$ bis zu einer bestimmten Energie E bekannt ist, dann liefert die Umkehrfunktion $E(\zeta)$ mit ganzzahligem ζ das Energiespektrum.

$\zeta(E)$ andererseits ergibt sich aus der Fläche $A(E)$ im Phasenraum, die alle Zustände mit Energien $\leq E$ umfasst, geteilt durch h: $\zeta = A/h$.

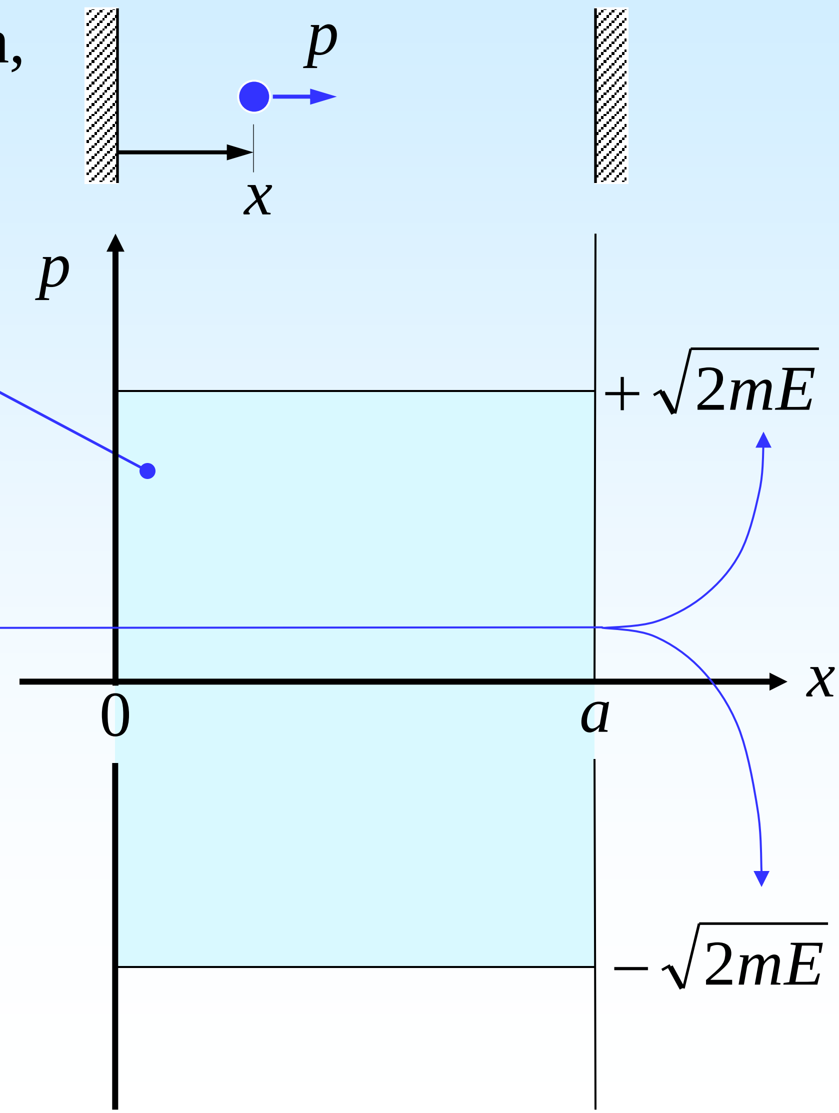
Energiespektrum: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge a, Teilchenmasse m

Alle Zustände mit Energien $\leq E$
liegen innerhalb eines Rechtecks
mit der Fläche $A = \underbrace{a}_{\text{Länge}} \cdot \underbrace{2\sqrt{2mE}}_{\text{Höhe}}$

Länge × Höhe

denn $E = \dfrac{p^2}{2m}$ aufgelöst nach p,
ergibt $p = \pm\sqrt{2mE}$



Energiespektrum: Translation

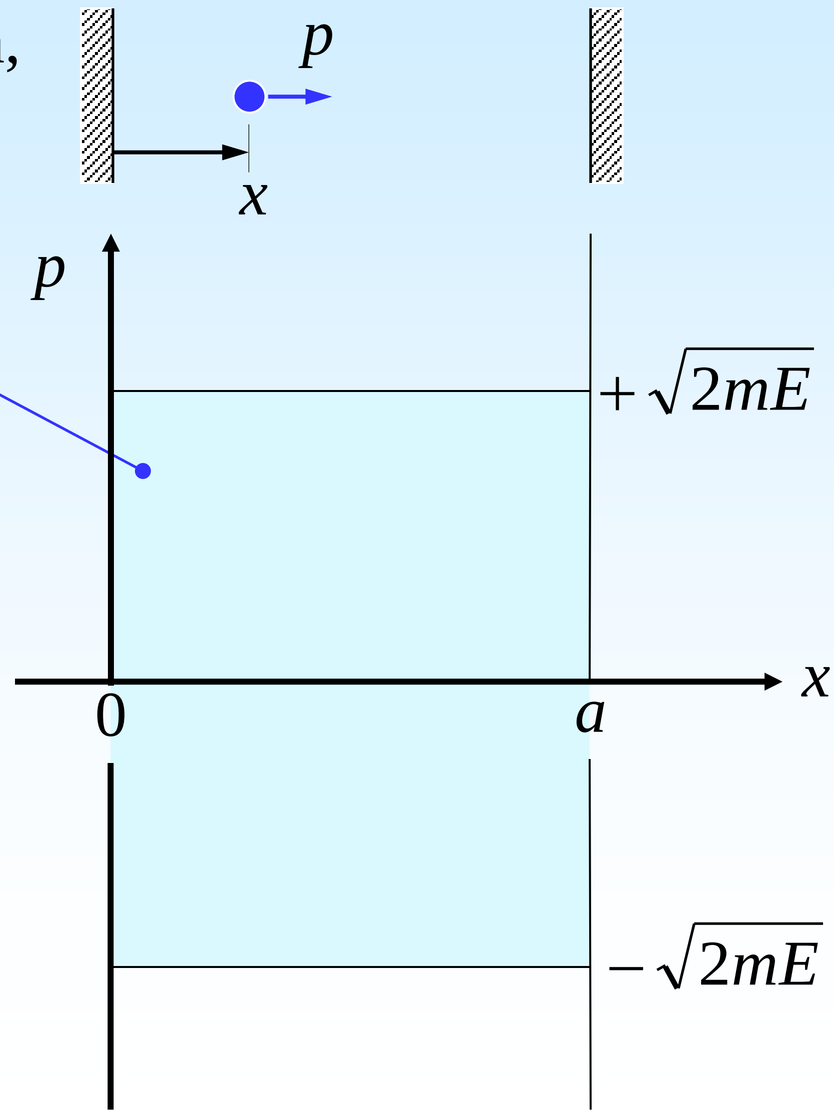
Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge *a*, Teilchenmasse *m*

Alle Zustände mit Energien $\leq E$ liegen innerhalb eines Rechtecks mit der Fläche $A = a \cdot 2\sqrt{2mE}$

Folglich $\zeta(E) = \dfrac{A}{h} = \dfrac{a \cdot 2\sqrt{2mE}}{h}$

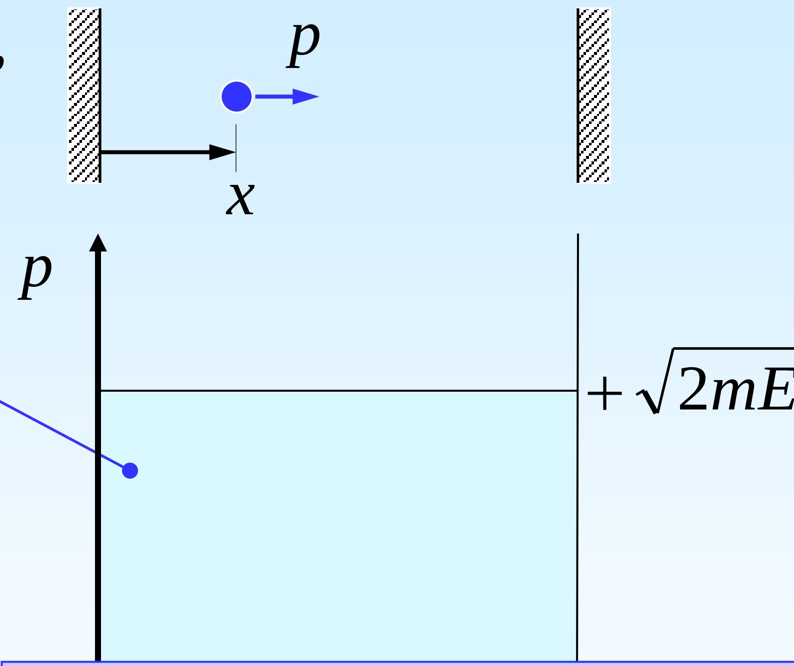
oder, aufgelöst nach E:

$$\boxed{E(\zeta) \approx \frac{h^2}{8ma^2}\zeta^2 \qquad \zeta = 1, 2, 3 \ldots}$$



Energiespektrum: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten, Kastenlänge a, Teilchenmasse m



Alle Zustände mit Energien $\leq E$ liegen innerhalb eines Rechtecks mit der Fläche $A = a \cdot 2\sqrt{2mE}$

Folglich $\zeta(E) = \dfrac{A}{h} = \dfrac{a \cdot 2\sqrt{2mE}}{h}$

oder, aufgelöst nach E:

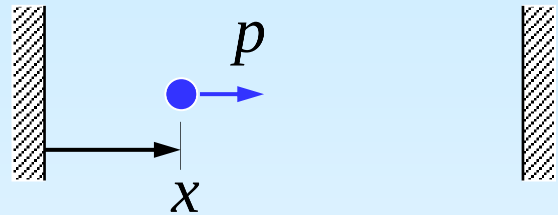
$$\boxed{E(\zeta) \approx \frac{h^2}{8ma^2}\zeta^2 \qquad \zeta = 1, 2, 3 \ldots}$$

Dass hier statt „ungefähr gleich“ „≈ “ auch „genau gleich“ „= “ hätte stehen können, ist Zufall.

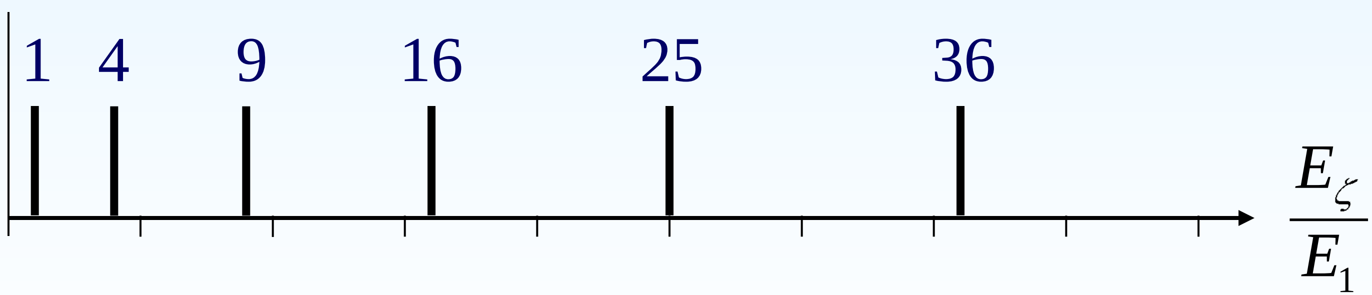
Unser einfacher Ansatz liefert nur Werte der Energie mit einer Unschärfe $\Delta\zeta \approx 1$.

Energiespektrum: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge a, Teilchenmasse m



$E_\zeta = E(\zeta)$ für $\zeta = 1, 2, 3$ ... aufgetragen, ergibt:



$$E_1 = \frac{h^2}{8ma^2}$$

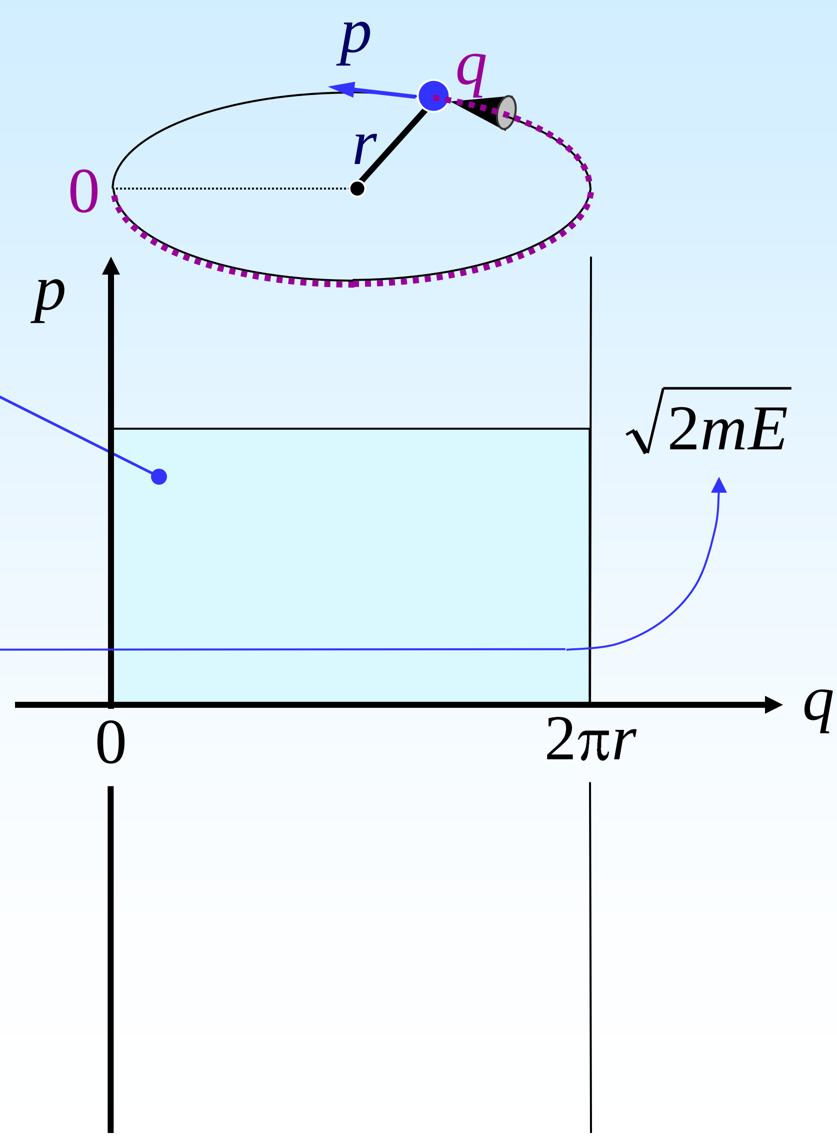
Energiespektrum: Rotation

Teilchen auf einer Kreisbahn
Umfang $2\pi r$, Teilchenmasse m

Alle Zustände mit Energien $\leq E$ liegen innerhalb eines Rechtecks mit der Fläche $A = \underbrace{2\pi r}\,\underbrace{\sqrt{2mE}}$

Länge × Höhe

denn $E = \dfrac{p^2}{2m}$ aufgelöst nach p,
ergibt $p = \sqrt{2mE}$



Energiespektrum: Rotation

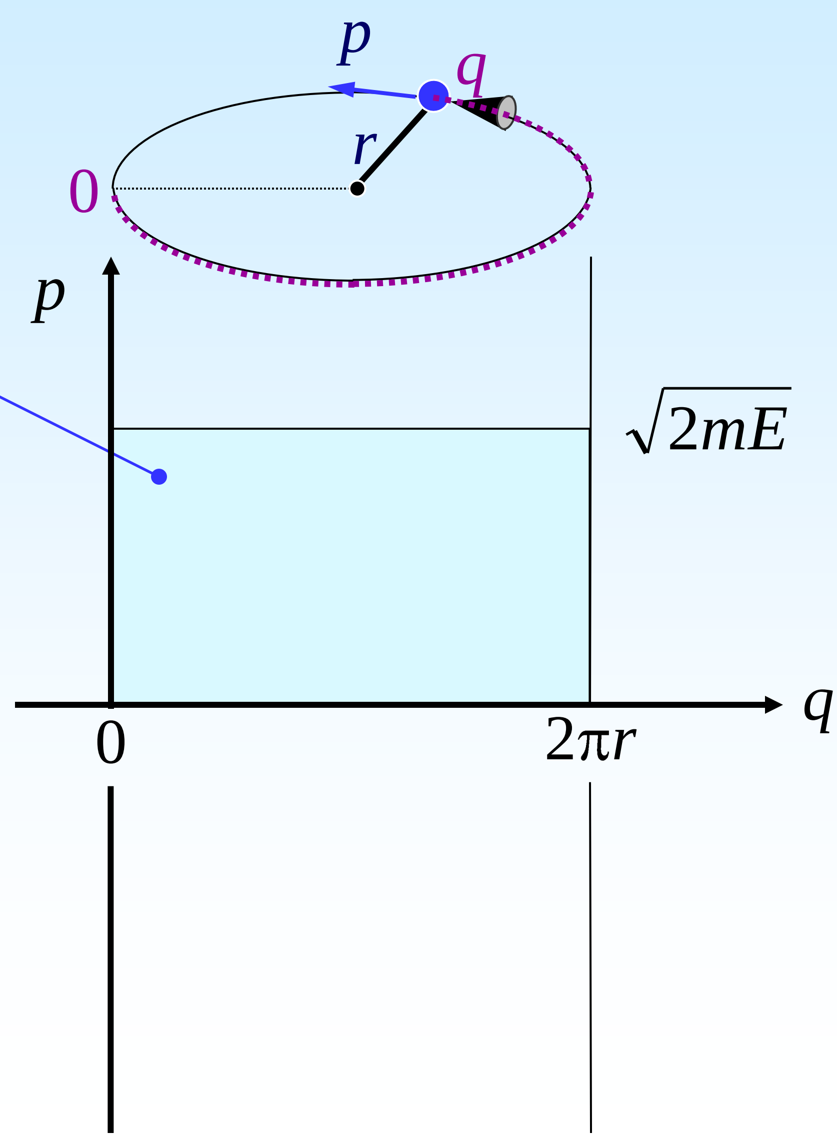
Teilchen auf einer Kreisbahn
Umfang $2\pi r$, Teilchenmasse m

Alle Zustände mit Energien $\leq E$ liegen innerhalb eines Rechtecks mit der Fläche $A = 2\pi r\sqrt{2mE}$

Folglich $\zeta(E) = \dfrac{A}{h} = \dfrac{2\pi r\sqrt{2mE}}{h}$

oder, aufgelöst nach E:

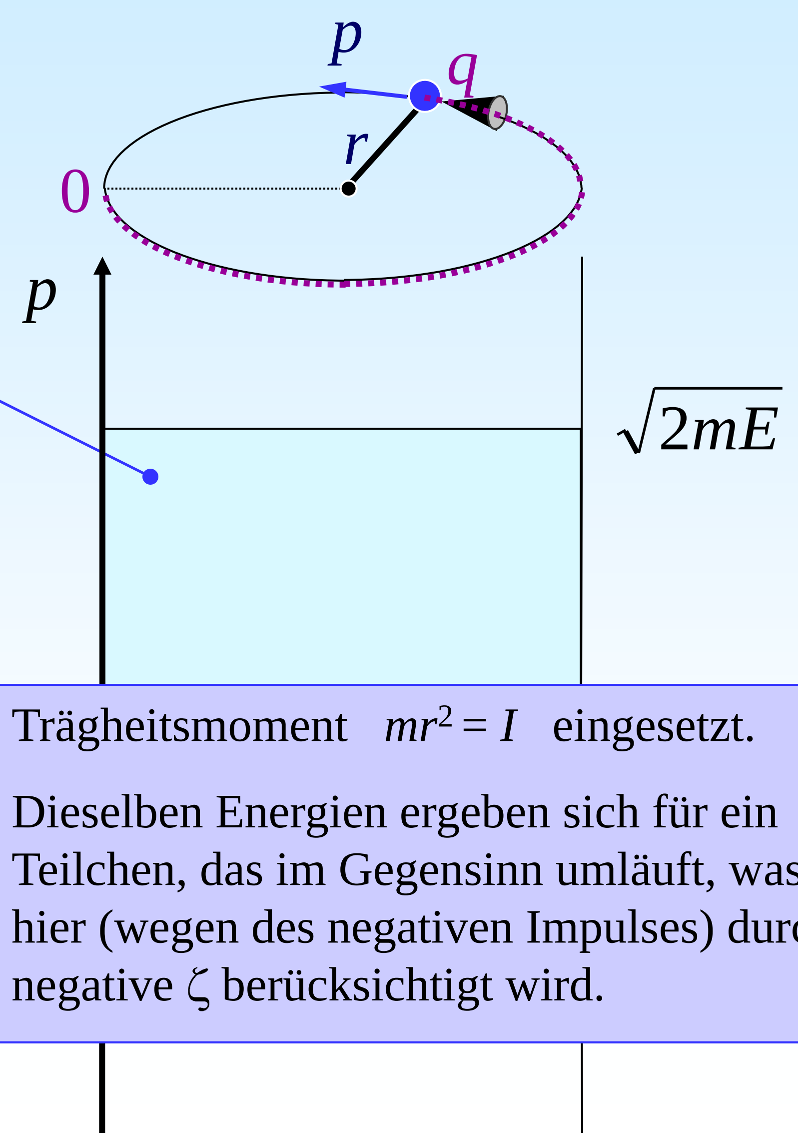
$$\boxed{E(\zeta) \approx \frac{h^2}{8\pi^2 I}\zeta^2 \qquad \zeta = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots}$$



Energiespektrum: Rotation

Teilchen auf einer Kreisbahn
Umfang $2\pi r$, Teilchenmasse m

Alle Zustände mit Energien $\leq E$ liegen innerhalb eines Rechtecks mit der Fläche $A = 2\pi r\sqrt{2mE}$



Folglich $\zeta(E) = \dfrac{A}{h} = \dfrac{2\pi r\sqrt{2mE}}{h}$

oder, aufgelöst nach E:

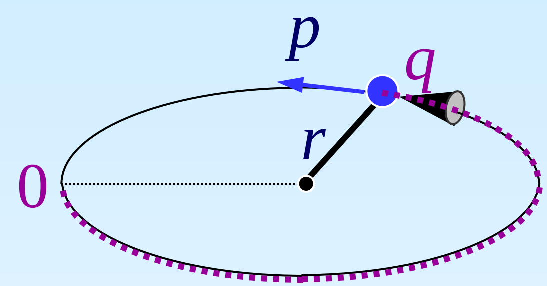
$$\boxed{E(\zeta) \approx \frac{h^2}{8\pi^2 I}\zeta^2 \qquad \zeta = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots}$$

Trägheitsmoment $mr^2 = I$ eingesetzt.

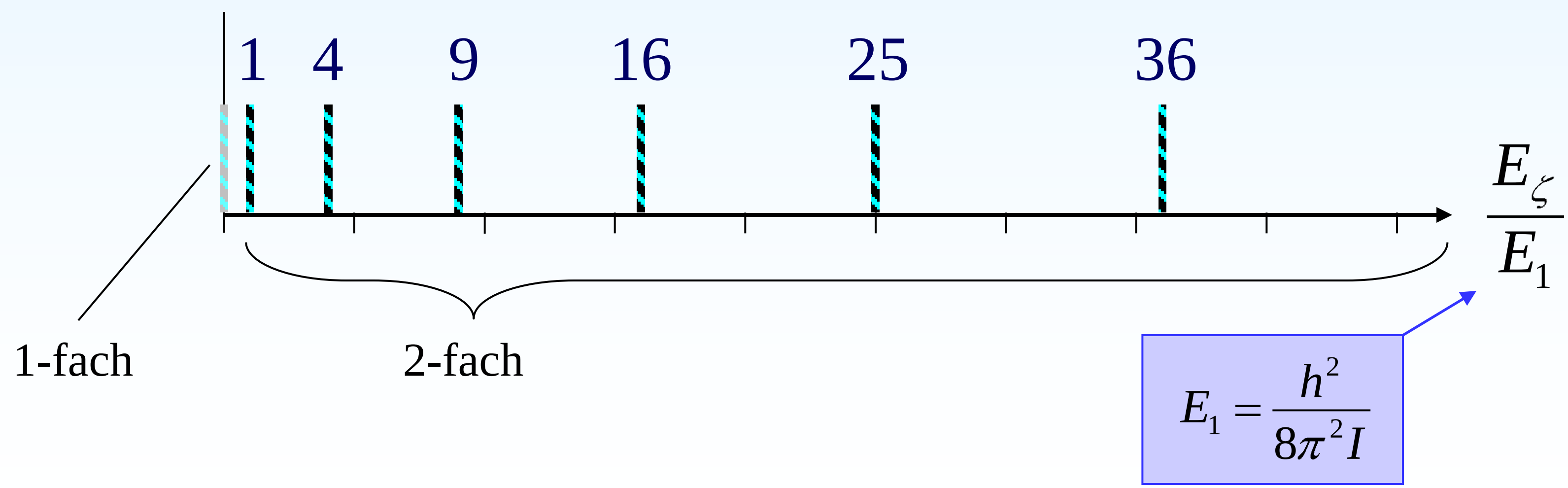
Dieselben Energien ergeben sich für ein Teilchen, das im Gegensinn umläuft, was hier (wegen des negativen Impulses) durch negative ζ berücksichtigt wird.

Energiespektrum: Rotation

Teilchen auf einer Kreisbahn
Umfang $2\pi r$, Teilchenmasse m

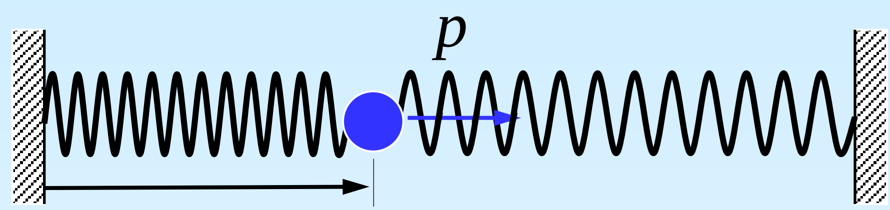


$E_\zeta = E(\zeta)$ für $\zeta = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ ... aufgetragen, ergibt:

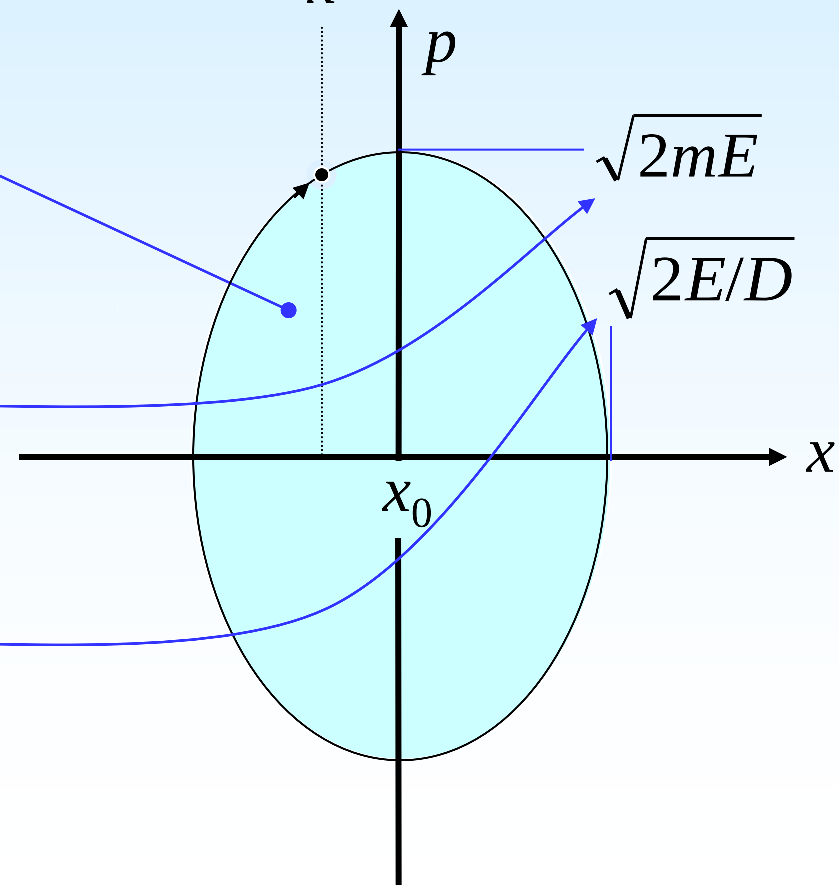


Energiespektrum: Schwingung

Teilchen federnd aufgehängt,
Federsteife D, Teilchenmasse m



Alle Zustände mit Energien $\leq E$
liegen innerhalb einer Ellipse



denn für $x = 0$ ergibt $E = \frac{p^2}{2m} + \cancel{\frac{1}{2}Dx^2}$,

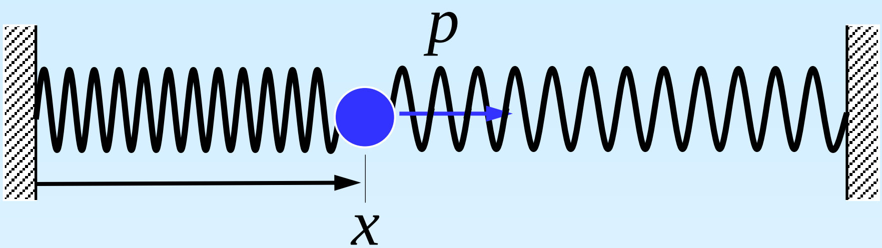
aufgelöst nach p: $p = \pm\sqrt{2mE}$

denn für $p = 0$ ergibt $E = \cancel{\frac{p^2}{2m}} + \frac{1}{2}Dx^2$,

aufgelöst nach x: $x = \pm\sqrt{2E/D}$

Energiespektrum: Schwingung

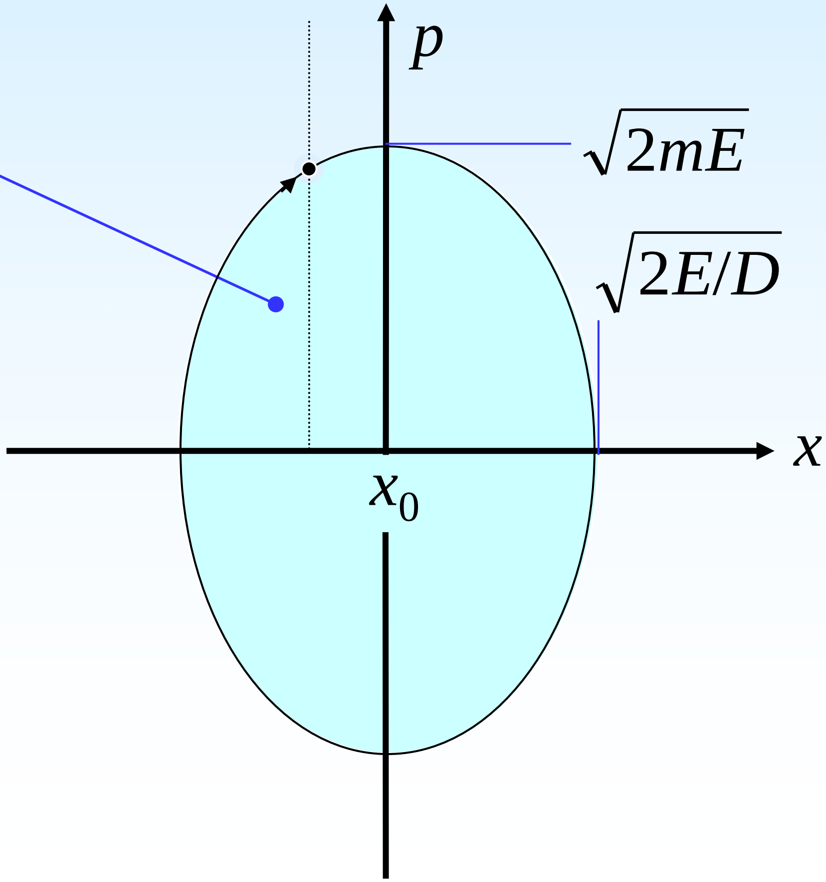
Teilchen federnd aufgehängt,
Federsteife *D*, Teilchenmasse *m*



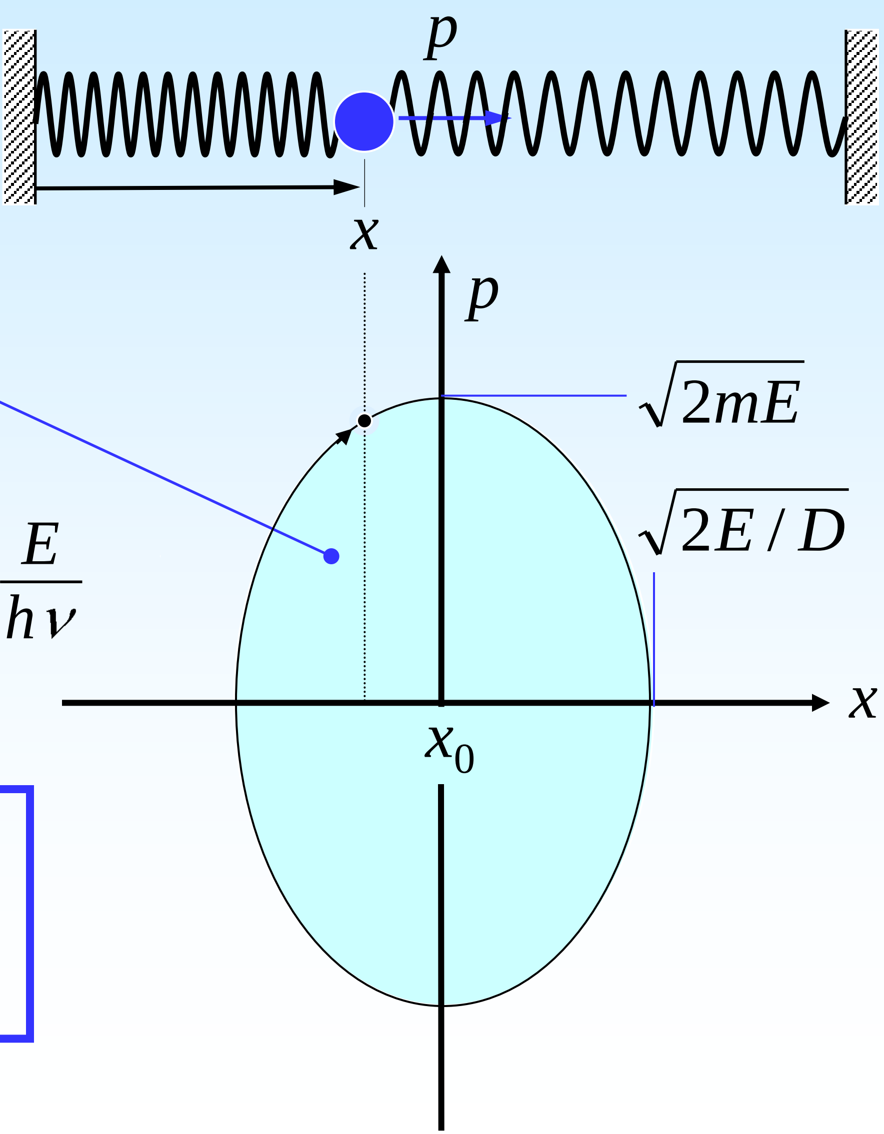
Alle Zustände mit Energien ≤ *E*
liegen innerhalb einer Ellipse

mit $$A = \pi \underbrace{\sqrt{2mE}} \cdot \underbrace{\sqrt{2E/D}}$$

Fläche = π × Halbachse × Halbachse



Energiespektrum: Schwingung



Teilchen federnd aufgehängt, Federsteife D, Teilchenmasse m

Alle Zustände mit Energien $\leq E$ liegen innerhalb einer Ellipse

mit $\quad A = \pi\sqrt{2mE}\cdot\sqrt{2E/D}$

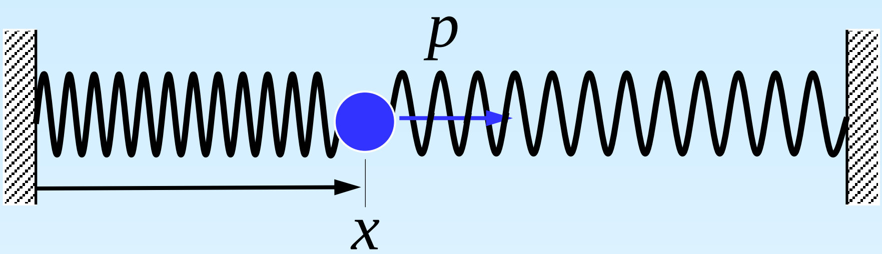
Folglich $\quad \zeta(E) = \dfrac{A}{h} = \underbrace{2\pi\sqrt{\dfrac{m}{D}}}_{\nu^{-1}}\cdot\dfrac{E}{h} = \dfrac{E}{h\nu}$

oder, aufgelöst nach E:

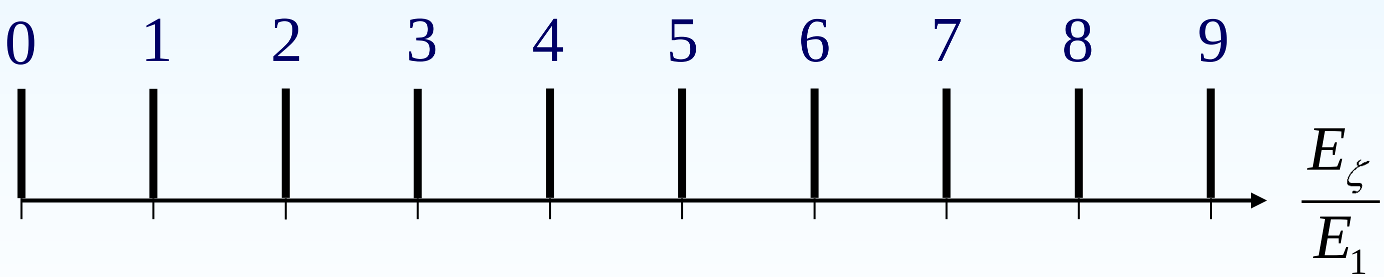
$$\boxed{E(\zeta) \approx h\nu\cdot\zeta \qquad \zeta = 0, 1, 2, 3 \ldots}$$

Energiespektrum: Schwingung

Teilchen federnd aufgehängt,
Federsteife D, Teilchenmasse m



$E_\zeta = E(\zeta)$ für $\zeta = 0, 1, 2, 3$ ... aufgetragen, ergibt:



$E_1 = h\nu$

Gliederung

- ✓ Der Ansatz
- ✓ Stationäre Zustände
- ✓ **Energiespektren**
- **Zustandssummen**
- Ausblick

Zustandssummen: Quantenlänge λ

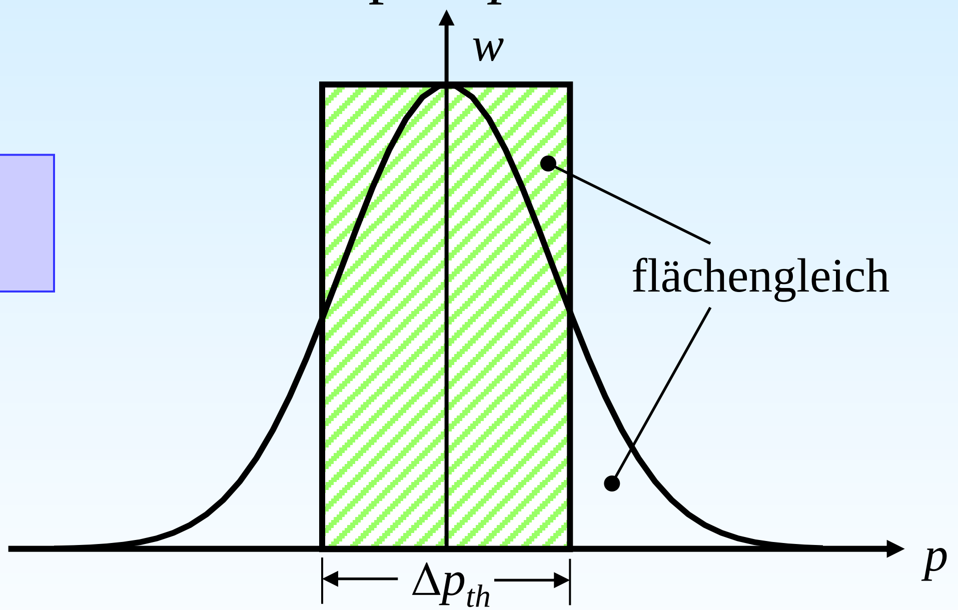
Teilchen in einer Umgebung der Temperatur *T*.

Wahrscheinlichkeit *w*, dass das Teilchen den Impuls *p* hat:

$$w \propto e^{-\frac{E_{kin}}{kT}} = e^{-\frac{p^2}{2mkT}}$$

Impulsunschärfe Δp, gekennzeichnet durch die Breite eines flächengleichen Rechtecks:

$$\Delta p_{th} = \sqrt{2\pi\, mkT}$$

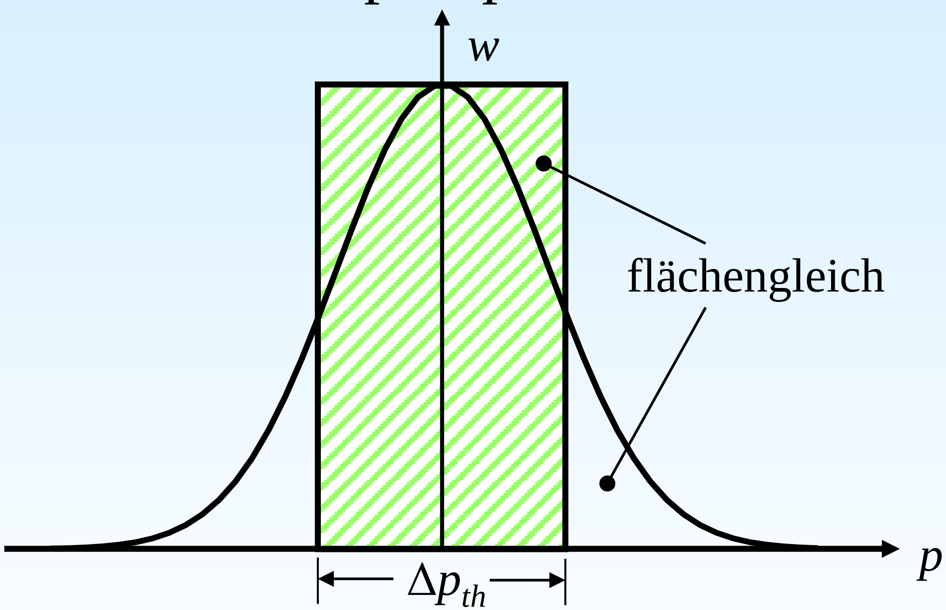


Die „thermische Impulsunschärfe“ Δp_{th} kennzeichnet – in Bezug auf die *p*-Richtung – die Ausdehnung des bei der Temperatur *T* zugänglichen Bereichs des Phasenraums. Zustände wesentlich außerhalb des Bereiches sind kaum erreichbar.

Zustandssummen: Quantenlänge λ

Teilchen in einer Umgebung der Temperatur *T*.
Wahrscheinlichkeit *w*, dass das Teilchen den Impuls *p* hat.

$$w \propto e^{-\frac{E_{kin}}{kT}} = e^{-\frac{p^2}{2mkT}}$$



$$\Delta p_{th} = \sqrt{2\pi\, mkT}$$

Ortsunschärfe eines Teilchens infolge seiner thermischen Impulsunschärfe: $\underbrace{\Delta x}_{\lambda_{th}} = h/\Delta p_{th}$

„Quantenlänge“ $\lambda_{th} = \dfrac{h}{\sqrt{2\pi\, mkT}}$

Der Ort eines Teilchens ist nicht genauer als bis auf die Quantenlänge λ_{th} definiert.

Zustandssummen: Grundgedanke

Die Zustandssummen bilden in der statistischen Physik den Schlüssel zur Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften.

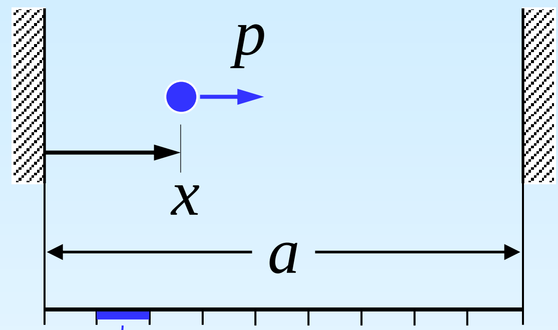
Die Zustandssumme z eines Teilchens ist auffassbar als die Anzahl der ihm (bei gegebener Temperatur) zugänglichen Zustände.

Ist (bei gegebener Temperatur) Δx_{th} der Bewegungsspielraum eines Teilchens (z. B. Kastenlänge a, Umfang einer Kreisbahn $2\pi r$) und A_{th} die Fläche des zugänglichen Bereichs des Phasenraums, $A_{\mathrm{th}} = \Delta x_{\mathrm{th}} \Delta p_{\mathrm{th}}$, dann gilt für die Zustandssumme z des Teilchens:

$$z = \frac{A_{th}}{h} = \frac{\Delta x_{th} \cdot \Delta p_{th}}{h} = \frac{\Delta x_{th}}{\lambda_{th}}$$

Zustandssummen: Translation

Teilchen in eindimensionalem Kasten,
Kastenlänge *a*, Teilchenmasse *m*



Bewegungsspielraum *a*

Rasterweite λ_{th}

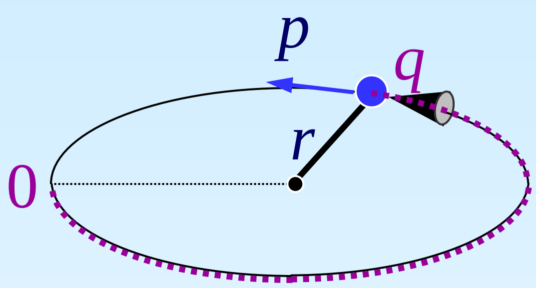
Translationszustandssumme $z_t = \dfrac{a}{\lambda_{th}}$

λ_{th} eingesetzt

$$z_t = \frac{a\sqrt{2\pi mkT}}{h}$$ gültig für $z_t \gg 1$

Zustandssummen: Rotation

Teilchen auf einer Kreisbahn
Umfang $2\pi r$, Teilchenmasse m



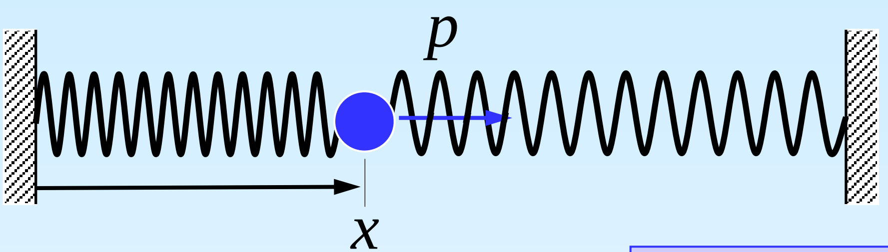
Bewegungsspielraum $2\pi r$
Rasterweite λ_{th}
Rotationszustandssumme $z_r = \dfrac{2\pi r}{\lambda_{th}}$

λ_{th} eingesetzt

$$z_r = \frac{2\pi\sqrt{2\pi IkT}}{h}$$ gültig für $z_r \gg 1$

Zustandssummen: Schwingung

Teilchen federnd aufgehängt,
Federsteife D, Teilchenmasse m



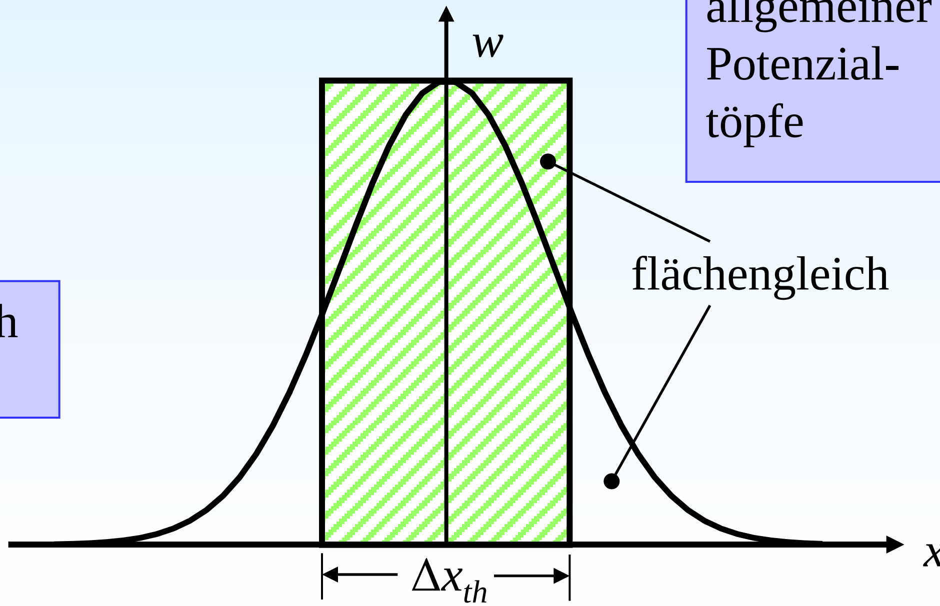
Bewegungsspielraum:
Wahrscheinlichkeit w, dass Teilchen am Ort x anzutreffen

Vorbild für Behandlung allgemeiner Potenzial-töpfe

$$w \propto e^{-\frac{E_{pot}}{kT}} = e^{-\frac{D x^2}{2kT}}$$

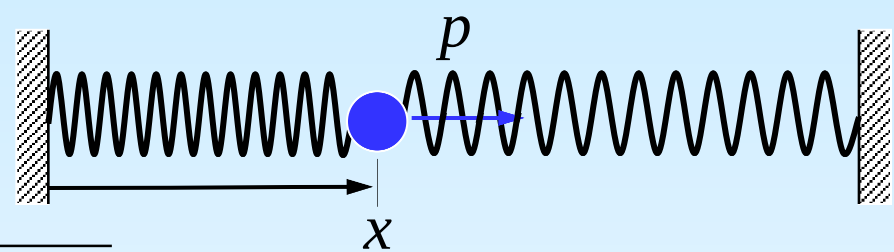
$$\Delta x_{th} = \sqrt{2\pi\, kT/D}$$

Bewegungsspielraum, gekennzeichnet durch die Breite eines flächengleichen Rechtecks



Zustandssummen: Schwingung

Teilchen federnd aufgehängt,
Federsteife D, Teilchenmasse m



Bewegungsspielraum: $\Delta x_{th} = \sqrt{2\pi\, kT/D}$

Rasterweite λ_{th}

Schwingungszustandssumme $\quad z_s = \dfrac{\Delta x_{th}}{\lambda_{th}}$

Δx_{th} und λ_{th} eingesetzt

$$= \sqrt{\frac{2\pi kT}{D}} \cdot \sqrt{\frac{2\pi mkT}{h}} = \underbrace{2\pi\sqrt{\frac{m}{D}}}_{\nu^{-1}}\,\frac{kT}{h}$$

$$\boxed{z_s = \frac{kT}{h\nu} \qquad \text{gültig für} \quad z_s \gg 1}$$

Gliederung

- ✓ Der Ansatz
- ✓ Stationäre Zustände
- ✓ Energiespektren
- ✓ **Zustandssummen**
- **Ausblick**

Ausblick

Nach demselben Muster lassen sich viele weitere Aufgaben lösen:

- Mehrdimensionale Bewegungen in verschiedenen Potentialtöpfen
- Drehung um feste oder freie Achsen
- Verhalten von Fermi- oder Bose-Gasen, Gasentartung
- Veranschaulichung und Abschätzung von Zustandssummen
- Ableitung chemischer Eigenschaften aus Molekülmodellen
- usw. usf.

Vielen Dank

für Ihre Aufmerksamkeit.

G. Job

Job-Stiftung für Thermo- und Stoffdynamik

c/o. Institut für Physikalische Chemie, Universität Hamburg

Georg.Job@gmx.de