

Schrödinger-Gleichung

2

- 2.1 Materiewellen 83
 - 2.1.1 Wirkungswellen in der Hamilton-Jacobi-Theorie 84
 - 2.1.2 Die de Broglie-Wellen 88
 - 2.1.3 Das Doppelspaltexperiment 91
 - 2.1.4 Aufgaben 93
- 2.2 Die Wellenfunktion 94
 - 2.2.1 Statistische Interpretation 94
 - 2.2.2 Die freie Materiewelle 98
 - 2.2.3 Wellenpakete 102
 - 2.2.4 Wellenfunktion im Impulsraum 107
 - 2.2.5 Periodische Randbedingungen 109
 - 2.2.6 Mittelwerte, Schwankungen 111
 - 2.2.7 Aufgaben 112
- 2.3 Der Impulsoperator 117
 - 2.3.1 Impuls- und Ortsdarstellung 117
 - 2.3.2 Nicht-Vertauschbarkeit von Operatoren 120
 - 2.3.3 Korrespondenzregel 122
 - 2.3.4 Aufgaben 125
- Kontrollfragen 128

Die zentrale Bewegungsgleichung der Quantenmechanik ist die Schrödinger-Gleichung, die allerdings nicht mathematisch streng aus ersten Prinzipien abgeleitet werden kann, sondern mehr oder weniger approximativ, vielleicht sogar spekulativ, eingeführt werden muss. Bei ihrer Begründung kann man sich jedoch von der Vorstellung leiten lassen, dass die Quantenmechanik als übergeordnete Theorie zu verstehen ist, die die makroskopisch korrekte Klassische Mechanik als entsprechenden Grenzfall enthält. Von der *klassischen Seite* macht insbesondere die Hamilton-Jacobi-Theorie (Kap. 3, Bd. 2) eine solche Korrespondenz deutlich. Mechanisch-optische Analogiebetrachtungen weisen der Klassischen Mechanik im Rahmen der Quantenmechanik die Rolle zu, die die geometrische Optik in der allgemeinen Lichtwellentheorie spielt. Wir wollen uns deshalb zu Beginn dieses Kapitels noch einmal in Erinnerung rufen, wie die klassische Hamilton-Jacobi-Theorie über ihr Wirkungswellenkonzept die Schrödinger-Gleichung *plausibel* werden lässt und erste Hinweise auf den Teilchen-Welle-Dualismus der Materie liefert.

Die experimentelle Ausnutzung der Wellennatur der Materie (z. B. Elektronenmikroskop, Strukturuntersuchungen mit Neutronenbeugung) gehört heute zur alltäglichen Arbeit des Physikers und ist deshalb nicht mehr spektakulär. Das ändert aber nichts daran, dass die Erkenntnis, dass der Materie in gewissen Situationen Wellencharakter zugeschrieben werden muss, zu den entscheidenden Errungenschaften der Physik des letzten Jahrhunderts zu zählen ist.

Der Wellencharakter der Materie ist die Ursache dafür, dass der *Zustand* eines physikalischen Systems durch eine *Wellenfunktion* $\psi(\mathbf{r}, t)$ beschrieben wird (Abschn. 2.2). Diese ist Lösung der Schrödinger-Gleichung, aber selbst keine messbare Teilcheneigenschaft. An einem *Gedankenexperiment* (Doppelspalt) werden wir uns den statistischen Charakter der Wellenfunktion verdeutlichen, der der Quantenmechanik, im Gegensatz zur Klassischen Mechanik, lediglich Wahrscheinlichkeitsaussagen gestattet. Typische Bestimmungsgrößen sind deshalb Wahrscheinlichkeitsdichten, Mittelwerte und Schwankungen (Abschn. 2.2.1, 2.2.6). Der statistische Charakter der Wellenfunktion ist auch für zwei wichtige Eigenarten der Quantenmechanik verantwortlich, nämlich für die Heisenberg'sche Unbestimmtheitsrelation (Abschn. 1.5) und für das *Breitfließen* von Wellenpaketen (Abschn. 2.2.3).

Die Quantenmechanik ordnet den beobachtbaren, also messbaren Variablen Operatoren zu. Dies werden wir zunächst am Beispiel des Impulsoperators (Abschn. 2.3) erkennen und dann für beliebige dynamische Variable verifizieren. Als wichtiges Charakteristikum der Quantenmechanik mit weit reichenden Konsequenzen muss die Nicht-Vertauschbarkeit dieser Operatoren angesehen werden. Die Reihenfolge, in der ich zwei oder mehrere Operatoren auf eine Wellenfunktion wirken lasse, ist in der Regel nicht beliebig, da jeder Operator die Wellenfunktion, und damit den Systemzustand, auf spezifische Weise ändern kann (Abschn. 2.3.2).

Den Abschluss dieses Kapitels bildet der Versuch, eine praktikable Übersetzungsvorschrift zu finden, mit der von der *vertrauten* klassischen Physik auf eine korrekte Formulierung der Schrödinger-Gleichung geschlossen werden kann.

2.1 Materiewellen

In Abschn. 1.4 haben wir uns mit dem *sonderbaren* Teilchen-Welle-Dualismus der elektromagnetischen Strahlung befasst. Neben eindeutigen Welleneigenschaften (Interferenz, Beugung) besitzt diese ebenso eindeutig auch Teilchencharakter (Photoeffekt, Compton-Effekt). Wir kommen nicht umhin, zur Deutung elektromagnetischer Phänomene mal das eine, mal das andere Bild zu verwenden, und das, obwohl sich die beiden Bilder im Rahmen unserer Erfahrungswelt eigentlich einander ausschließen. Der Teilchen-Welle-Dualismus der elektromagnetischen Strahlung erscheint andererseits aufgrund experimenteller Belege so überzeugend, dass die Schlussfolgerung, dass er auch in *umgekehrter Richtung* gültig sein sollte, eine plausible These darstellt. Trotzdem muss die Erkenntnis, dass es diesen Dualismus auch für Objekte gibt, die man normalerweise als *Teilchen (Korpuskeln)* bezeichnen würde, zu den größten Errungenschaften der Physik in diesem Jahrhundert gezählt werden. Den historischen Startpunkt für eine Wellentheorie der Materie stellten kühne Spekulationen des französischen Physikers L. de Broglie (Dissertation 1924) dar, die kurz darauf E. Schrödinger (1925/26) zur Entwicklung seiner *Wellenmechanik* inspirierten, obwohl experimentelle Bestätigungen des von de Broglie postulierten Wellenaspekts der Materie erst ab 1927 (C.J. Davisson, L.H. Germer) zur Verfügung standen.

Die Idee, der Materie (den Teilchen) Welleneigenschaften zuzuordnen, ist allerdings wesentlich älter. Sie geht auf Hamilton zurück, der bereits in der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts auf eine interessante Analogie zwischen geometrischer Optik und klassischer Newton-Mechanik hinwies, die darin besteht, dass beide mit einem identischen mathematischen Formalismus behandelt werden können. Mithilfe der Hamilton-Jacobi-Theorie (s. Abschn. 3.6, Bd. 2) lässt sich in der Tat für die Klassische Mechanik eine Wellengleichung ableiten, die der sogenannten *Eikonalgleichung* der geometrischen Optik mathematisch äquivalent ist. Das *verführt* zu der folgenden Spekulation: Die geometrische Optik stellt bekanntlich nur einen Grenzfall mit beschränktem Gültigkeitsbereich dar, der zum Beispiel wichtige Phänomene wie Interferenz und Beugung **nicht** erklären kann. Sie muss deshalb zu einer *Wellenoptik* verallgemeinert werden. In ihrem Gültigkeitsbereich ist die geometrische Optik allerdings exakt. Die Situation ist ganz ähnlich für die Klassische Mechanik. Auch sie besitzt offenbar nur eine begrenzte Anwendbarkeit, kann zum Beispiel die stationären Energiezustände des Atoms nicht erklären. Es könnte nun aber doch sein, dass auch die Klassische Mechanik nur als Grenzfall einer übergeordneten *Wellenmechanik* aufzufassen ist, so wie es die geometrische Optik für die Lichtwellentheorie ist. Wenn das aber wirklich so ist, dann sollte es auch möglich sein, aus dem bekannten Übergang *geometrische Optik* \implies *Lichtwellentheorie* durch Analogieschlüsse Hinweise auf die zu findende Wellenmechanik abzuleiten. Dass das in der Tat möglich ist, haben wir im Detail in Abschn. 3.6, Band 2 demonstrieren können. Wegen ihrer grundsätzlichen Bedeutung wollen wir im nächsten Kapitel an die wesentlichen Gedankenschritte noch einmal erinnern.

2.1.1 Wirkungswellen in der Hamilton-Jacobi-Theorie

Die Hamilton-Jacobi-Theorie der Klassischen Mechanik (s. Kap. 3, Bd. 2), an die wir uns bereits in Abschn. 1.5.2 zum Bohr'schen Atommodell erinnert haben, basiert auf dem Konzept der kanonischen Transformation (s. Abschn. 2.5, Bd. 2). Darunter versteht man einen Variablenwechsel von *alten* auf *neue* Koordinaten \bar{q} und Impulse \bar{p} ,

$$(q, p) \longrightarrow (\bar{q}, \bar{p}), \\ S(q, \bar{p}, t)$$

der die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen invariant lässt und deshalb *erlaubt* ist. Wenn man die Transformation geschickt wählt, kann die Lösung des physikalischen Problems in den *neuen* Variablen sehr viel einfacher sein als in den *alten*. In diesem Sinne baut die Hamilton-Jacobi-Theorie die Methode der kanonischen Transformation zu einem allgemeinen Lösungsverfahren aus.

Die *Erzeugende* S der Transformation, die man auch *Wirkungsfunktion* nennt, soll eine Funktion der *alten* Koordinaten $q = (q_1, q_2, \dots, q_s)$ und der *neuen* Impulse $\bar{p} = (\bar{p}_1, \bar{p}_2, \dots, \bar{p}_s)$ sein. Es gelten die Transformationsformeln,

$$p_j = \frac{\partial S}{\partial q_j}; \quad \bar{q}_j = \frac{\partial S}{\partial \bar{p}_j}; \quad \bar{H} = H + \frac{\partial S}{\partial t} \quad (j = 1, 2, \dots, s),$$

die wir hier ohne Ableitung angeben. Der an Details interessierte Leser sei auf Abschn. 2.5.3, Bd. 2 verwiesen. Im Hamilton-Jacobi-Verfahren wird die Transformation, d. h. die Erzeugende derselben, so gewählt, dass entweder alle \bar{q}_j zyklisch und damit automatisch alle \bar{p}_j konstant sind (s. Abschn. 1.5.2), oder aber **alle** *neuen* Variablen (\bar{q}, \bar{p}) zeitunabhängige Konstante sind. Im letzten Fall ist das mechanische Problem dann trivial gelöst. Die Konstanten sind durch entsprechend viele Anfangsbedingungen festgelegt. Eine solche Transformation ist sicher dann erreicht, wenn die *neue* Hamilton-Funktion \bar{H} bereits konstant, zum Beispiel Null, ist:

$$H\left(q_1, q_2, \dots, q_s, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \frac{\partial S}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_s}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (2.1)$$

Wir beschränken die folgenden Betrachtungen der Einfachheit halber auf ein einzelnes Teilchen ($q = r$) in einem konservativen Kraftfeld:

$$H = T + V = E = \text{const.} \quad (2.2)$$

Dann lässt sich die Zeitabhängigkeit der Wirkungsfunktion abseparieren:

$$S(r, \bar{p}, t) = W(r, \bar{p}) - Et. \quad (2.3)$$

2.1 Materiewellen

Wegen $\vec{p} = \text{const}$, definiert die Bedingung $W = \text{const}$ eine feste Fläche im durch die Koordinaten q_j aufgespannten Konfigurationsraum, über die sich die Flächen $S = \text{const}$ mit der Zeit hinwagschieben. Diese $S = \text{const}$ -Flächen heißen *Wirkungswellen*. Man kann ihnen eine Geschwindigkeit, die Wellen- oder Phasengeschwindigkeit \mathbf{u} , zuordnen. Diese ist definiert als die Geschwindigkeit eines bestimmten Punktes der Wellenfront. Aus

$$dS \stackrel{!}{=} 0 = \nabla_r W \cdot d\mathbf{r} - E dt$$

folgt:

$$\nabla_r W \cdot \mathbf{u} = E. \quad (2.4)$$

\mathbf{u} ist per definitionem senkrecht zu den Wirkungswellenfronten orientiert. Da aber auch $\nabla_r W$ orthogonal zu den Flächen $W = \text{const}$ liegt und mit dem Teilchenimpuls

$$\mathbf{p} = \nabla_r W \quad (2.5)$$

identisch ist, müssen Wellengeschwindigkeit \mathbf{u} und Teilchengeschwindigkeit \mathbf{v} parallel sein. Dann folgt aus (2.4):

$$u = \frac{E}{p} = \frac{E}{m v} \implies u v = \text{const}. \quad (2.6)$$

Wegen $E^2 = u^2 (\nabla_r W)^2$ und (2.1) bis (2.3) ergibt sich die

Wellengleichung der Klassischen Mechanik:

$$(\nabla_r S)^2 = \frac{1}{u^2} \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right)^2. \quad (2.7)$$

Wirkungswellen- und Teilchenbewegung sind zwar wesensfremde, aber doch äquivalente Lösungen des mechanischen Problems. Hier deutet sich ein

► Teilchen-Welle-Dualismus

der Materie an.

Wir wollen nun, wie angekündigt, in der detailliert bekannten Lichtwellentheorie nach weiteren Analogien suchen. Ein elektromagnetischer Vorgang wie *Licht* wird durch die Wellengleichung

$$\nabla^2 \varphi - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = 0 \quad (2.8)$$

für das skalare elektromagnetische Potential $\varphi(\mathbf{r}, t)$ beschrieben, wobei $n = n(\mathbf{r})$ die Brechzahl des Mediums und c die Lichtgeschwindigkeit des Vakuums sind. $u = c/n$ ist dann die

Lichtgeschwindigkeit im Medium. Man erkennt leicht, dass für $n = \text{const}$ die ebene Welle ((4.134), Bd. 3)

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (2.9)$$

die Wellengleichung löst, falls

$$k = \omega \frac{n}{c} = \frac{\omega}{u} = \frac{2\pi \nu}{\lambda \nu} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.10)$$

gewählt wird. Ist $n = n(\mathbf{r}) \neq \text{const}$, so sorgt die Ortsabhängigkeit der Brechzahl für Beugungsphänomene. Man wählt nun zweckmäßig den Ansatz

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_0(\mathbf{r}) \exp \left[i \frac{k}{n} (L(\mathbf{r}) - ct) \right], \quad (2.11)$$

wobei $L(\mathbf{r})$ als *Lichtweg* oder *Eikonal* bezeichnet wird. Setzt man (2.11) in die Wellengleichung (2.8) ein, so ergibt sich ein recht komplizierter Ausdruck, der sich unter den Annahmen der geometrischen Optik,

$\varphi_0(\mathbf{r})$ schwach ortsabhängig,

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \ll \text{Änderungen im optischen Medium,}$$

zur sogenannten *Eikonalgleichung* vereinfacht ((3.198), Bd. 2):

$$(\nabla L(\mathbf{r}))^2 = n^2 = \frac{c^2}{u^2}. \quad (2.12)$$

Die Lösungen $L = \text{const}$ definieren nach (2.11) Flächen konstanter Phase, also Wellenfronten. Deren Orthogonaltrajektorien sind die *Lichtstrahlen* der geometrischen Optik.

Die Eikonalgleichung ähnelt formal der Wellengleichung (2.7) der Klassischen Mechanik, sodass der Analogieschluss *reizt*, die Klassische Mechanik für den geometrisch-optischen Grenzfall einer übergeordneten Wellenmechanik zu halten. Dieser Analogieschluss ist natürlich kein physikalischer Beweis, sondern basiert im Wesentlichen auf Plausibilität. Seine Rechtfertigung kann nur nachträglich durch Vergleich der Resultate mit experimentellen Fakten erfolgen. Diesen Standpunkt werden wir im Übrigen in den nächsten Abschnitten noch ein paarmal einnehmen müssen.

Wenn wir nun die dem Teilchen zuzuordnende Wirkungswelle, die die Wellengleichung (2.7) erfüllt, zur Lichtwelle (2.11) in Analogie setzen, so sollten die Wirkungswellenfronten $S = W - Et$ der Phase $k/n(L - ct)$ entsprechen. Es müsste also gelten:

$$E \sim \frac{k}{n} c = k u \sim \frac{u}{\lambda} = \nu.$$

2.1 Materiewellen

Schreiben wir

$$E = h \nu, \quad (2.13)$$

so folgt weiter: $\lambda = u/\nu = E/(p \nu) = h/p$. Dies bedeutet:

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (2.14)$$

Energie E und Impuls p des Teilchens legen somit die Frequenz ν und die Wellenlänge λ der zugehörigen Wirkungswelle fest. (2.13) und (2.14) werden vom Experiment glänzend bestätigt, wenn man h mit dem Planck'schen Wirkungsquantum identifiziert. Die obigen Analogieschlüsse gehen letztlich auf L. de Broglie zurück. Man nennt deshalb λ die *de Broglie-Wellenlänge* des Teilchens.

Eliminieren wir mit dem Ansatz (2.11) die Zeitdifferentiationen in der Wellengleichung (2.8), so bleibt zu lösen:

$$\nabla_r^2 \varphi + k^2 \varphi = \Delta_r \varphi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2} \varphi = 0.$$

Im Sinne unseres Analogieschlusses sollte nun auch die Teilchenwelle durch eine entsprechende

► **Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$**

charakterisiert sein, die wegen

$$\frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{p}^2 = \frac{1}{\hbar^2} 2m(E - V); \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

eine Differentialgleichung erfüllt, die als

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, t) = E \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.15)$$

die Basisgleichung der gesamten Wellenmechanik darstellt. Es handelt sich dabei, wie wir später noch genauer analysieren werden, um eine sogenannte Eigenwertgleichung des

Hamilton-Operators

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(\mathbf{r}). \quad (2.16)$$

Obwohl die Schrödinger-Gleichung (2.15) nicht mathematisch streng abgeleitet werden kann, sondern Plausibilitätsüberlegungen und Analogieschlüsse benötigt, hat sie sich doch widerspruchsfrei bewährt. Sie markiert als Meilenstein den Durchbruch der klassischen Physik zur modernen Quantenphysik.

Nutzen wir noch einmal die Analogie zwischen der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ und der Lösung (2.11) der Wellengleichung (2.8) aus, so können wir wegen der speziellen Zeitabhängigkeit mit (2.13) und (2.14) offensichtlich die folgende Zuordnung treffen:

$$E \implies i\hbar \frac{\partial}{\partial t} . \quad (2.17)$$

Da links eine Variable (Zahl!) und rechts ein Differentialoperator steht, ist diese Zuordnung nur dann sinnvoll, wenn wir sie uns stets auf eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$, deren Eigenschaften in Abschn. 2.2 untersucht werden, angewendet denken. In diesem Sinne wird aus (2.15) die

zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) . \quad (2.18)$$

2.1.2 Die de Broglie-Wellen

Die Wellenvorstellung der Materie führt zu einer äußerst interessanten Interpretationsmöglichkeit des Bohr'schen Postulats stationärer Elektronenbahnen im Atom. Wenn das Elektron wirklich als Welle aufgefasst werden darf, dann sind stationäre Elektronenbahnen offenbar dadurch ausgezeichnet, dass sie **stehenden** Elektronenwellen entsprechen. Ansonsten würden sie sich nach einigen Umläufen durch destruktive Interferenz auslöschen. Der Bahnumfang muss also ein ganzzahliges Vielfaches der Elektronen-Wellenlänge λ sein. Diese Überlegung ist in der Tat kompatibel mit der Bohr'schen Quantenbedingung. Formulieren wir diese nämlich wie in Aufgabe 1.5.3 für stationäre Kreisbahnen (Radius r , Umlaufgeschwindigkeit $v = r\dot{\phi}$),

$$\int p \, dr = 2\pi r m v = n h ; \quad n = 1, 2, 3, \dots ,$$

und setzen hierin die de Broglie-Beziehung (2.14) für $p = m v$ ein, so folgt:

$$2\pi r = n \lambda ; \quad n = 1, 2, 3, \dots . \quad (2.19)$$

2.1 Materiewellen

Das sieht fast wie ein *Beweis* der Bohr'schen Quantenbedingung aus. Gleichermäßen scheint auch das Problem der Energieabstrahlung beseitigt zu sein. Ein umlaufendes Elektron stellt einen schwingenden Dipol dar, eine stehende Welle sollte dagegen als zeitlich unveränderliches Gebilde auch nach den Gesetzen der klassischen Elektrodynamik ohne Strahlungsnotwendigkeit existieren können.

Die Wellennatur der Materie manifestiert sich im Experiment in Beugungs- und Interferenzphänomenen. Diese sichtbar zu machen, gelang erstmals Davisson und Germer (1927) mit Elektronenreflexionsexperimenten an Ni-(111)-Flächen. Die Intensitätsverteilung der reflektierten Elektronen entsprach einem Laue-Rückstrahldiagramm, wie es von Röntgenstrahlexperimenten bekannt war. Insbesondere waren die Helligkeitsmaxima durch die Laue'schen Fundamentalgleichungen (1.78) bzw. (1.80) bestimmt. Alle aus Röntgenbeugungsphänomenen ableitbaren Schlussfolgerungen ließen sich auch bei der Beugung von Elektronenwellen nachvollziehen. Davisson und Germer konnten 1928 direkt nachweisen, dass die Elektronenbeugung die Bragg-Bedingung (1.86) erfüllt, sodass umgekehrt bei bekannter Gitterkonstanten des Kristalls auf die Wellenlänge der den Elektronen zuzuordnenden Materiewellen geschlossen werden konnte. Man fand in voller Übereinstimmung mit (2.14), dass diese umgekehrt proportional zum Elektronenimpuls ist.

Beugungsphänomene wurden in der Folgezeit nicht nur bei Elektronen, sondern auch bei anderen Teilchenstrahlungen beobachtet, wenn nur die de Broglie-Wellenlänge λ in die Größenordnung der Atomabstände des Kristallgitters kommt. Dazu sind die folgenden Faustregeln nützlich (e^- : Elektron; p: Proton; n: Neutron; X: Röntgen):

$$\lambda(e^-) [\text{\AA}] = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}} \approx \frac{12,25}{\sqrt{E[\text{eV}]}} , \quad (2.20)$$

$$\lambda(n, p) [\text{\AA}] = \frac{h}{\sqrt{2M_{n,p} E}} \approx \frac{0,28}{\sqrt{E[\text{eV}]}} , \quad (2.21)$$

$$\lambda(X) [\text{\AA}] = \frac{hc}{E} \approx \frac{12,4}{E[\text{keV}]} . \quad (2.22)$$

(Die Energieeinheit eV (Elektronvolt) haben wir in (1.57) definiert.) Elektronen, die eine Beschleunigungsspannung von 10^4 V durchlaufen, besitzen demnach eine Wellenlänge von etwa $0,12 \text{ \AA}$, die derjenigen von harter Röntgenstrahlung entspricht. Als geladene Teilchen reagieren Elektronen natürlich sehr heftig mit Materie, was ihnen unter anderem nur eine sehr geringe Eindringtiefe in einen Festkörper gestattet. Andererseits hat sich diese *Empfindlichkeit* der Elektronenbewegung zu Strukturanalysen von Oberflächen und dünnen Schichten erfolgreich auswerten lassen. Die Interferenz der an einer Kristalloberfläche reflektierten Elektronenwellen führt letztlich zu einer Abbildung der Struktur des Objekts. Das auf diesem Prinzip arbeitende Elektronenmikroskop hat wegen der gegenüber Licht wesentlich kleineren de Broglie-Wellenlänge ein beträchtlich höheres Auflösungsvermögen als das Lichtmikroskop. Mit dem Elektronenmikroskop lassen sich inzwischen selbst atomare bzw. molekulare Strukturen sichtbar machen. Ein besonderer Vorteil besteht darin,

dass man durch Variation der Beschleunigungsspannung die Elektronenwellenlänge fast beliebig einstellen kann, wobei allerdings bei sehr hohen Spannungen die relativistische Massenveränderlichkeit zu berücksichtigen ist.

Einen besonderen Stellenwert hat die Neutronenbeugung erlangt. Um nach (2.21) die Wellenlänge der Neutronen in die Größenordnung von 1 \AA zu bringen, hat man diese auf *thermische* Geschwindigkeiten abzubremesen, zum Beispiel indem man sie Paraffinblöcke durchqueren lässt. Heute erhält man ergiebige Neutronenströme passender kinetischer Energie aus Kernreaktoren. Das Neutron ist ungeladen, kann deshalb wesentlich ungestörter in einen Kristall eindringen als das Elektron. Andererseits besitzt es ein permanentes magnetisches Moment, das mit eventuell vorhandenen Momenten des zu untersuchenden Festkörpers in Wechselwirkung tritt. Neutronenbeugung ist deshalb ein exzellentes Hilfsmittel zur Sichtbarmachung magnetischer Strukturen.

Wir haben im Abschn. 2.1.1 die Materiewellen durch Analogieschlüsse eingeführt und soeben von ihrer experimentellen Bestätigung berichtet. Wir müssen uns nun um ein vertieftes Verständnis der physikalischen Bedeutung des Phänomens *Materiewelle* bemühen.

Zunächst einmal darf man trotz möglicherweise vergleichbarer Wellenlänge Materiewellen nicht etwa für physikalisch wesensverwandt mit elektromagnetischer (Röntgen-)Strahlung halten. Sie sind grundsätzlich voneinander verschieden. In gewisser Weise muss man den Materiewellen sogar die eigentliche *Messbarkeit* absprechen. Erinnern wir uns einmal daran, welche Bestimmungsstücke einen „normalen“ Wellenvorgang auszeichnen. Da sind zunächst die Eigenschaften *Amplitude* und *Phase*. Die Amplitude charakterisiert den in der Welle realisierten physikalischen Vorgang, ist deshalb von Wellentyp zu Wellentyp verschieden. Die Phase ist dagegen das allen Wellenvorgängen Gemeinsame und kennzeichnet damit ganz allgemein die Wellennatur des physikalischen Prozesses. Sie bestimmt die Gesamtheit aller Punkte mit gleichen Abweichungen der physikalischen Größe von ihrem Gleichgewichtswert. Bei stetig veränderlicher Amplitude bilden solche Punkte Phasenflächen. Der Abstand zweier Flächen gleicher Phase definiert die Wellenlänge. Die Verschiebungsgeschwindigkeit eines Punktes auf einer solchen Phasenfläche nennt man *Phasengeschwindigkeit* der Welle.

Ausbreitungsrichtung, Schwingungsrichtung (longitudinale, transversale *Polarisation*) und Wellenlänge sind im Allgemeinen leicht messbare Bestimmungsstücke einer „normalen“ Welle. Nicht ganz so leicht ist die Messung der Phasengeschwindigkeit, bisweilen auch die der Amplitude. Beides ist jedoch möglich.

Bei den Materiewellen fällt die Ausbreitungsrichtung mit der Bewegungsrichtung der Materie zusammen, ist somit bekannt. Die Wellenlänge ergibt sich aus der de Broglie-Beziehung (2.14) und lässt sich, wie bereits erläutert, mithilfe von Beugungsexperimenten an Netzebenen passender Kristallgitter bestimmen. Es ist aber noch niemandem gelungen, die Phasengeschwindigkeit oder die Amplitude einer Materiewelle **direkt** zu messen! Materiewellen und die uns aus der klassischen Physik vertrauten elektromagnetischen Wellen

verhalten sich zwar in vielerlei Hinsicht ganz offenbar sehr ähnlich, scheinen aber dennoch in ihrer tieferen physikalischen Bedeutung grundverschieden zu sein.

Um das Wesen der Materiewellen wirklich zu verstehen, haben wir uns noch einmal grundsätzlich mit dem *Teilchen-Welle-Dualismus* zu befassen. Unbestritten ist die Beobachtung, dass sich das Elektron in manchen Experimenten wie ein Teilchen, in anderen wie eine Welle verhält. Bedeutet das, dass wir das Elektron, oder irgendein anderes *passendes* Teilchen, zumindest in manchen Situationen direkt als Welle zu verstehen haben? So einfach ist das dann wohl doch nicht! Schon bei etwas genauerer Betrachtung der für Wellen typischen Beugungsphänomene stößt man auf ganz erhebliche Verständnisschwierigkeiten. Elementare Teilchen wie Elektronen besitzen die besondere Eigenschaft der *Unteilbarkeit*, die andererseits einer Welle auf keinen Fall zugeschrieben werden kann. An der Grenze zweier Medien, in denen die Welle unterschiedliche Phasengeschwindigkeiten aufweist, wird diese bekanntlich in eine reflektierte und eine gebrochene Partialwelle zerlegt, also „geteilt“. Für das unteilbare Elektron müssen wir dagegen annehmen, dass es entweder reflektiert wird oder aber in das zweite Medium eindringt. Beides gleichzeitig kann nicht möglich sein. – Ganz ähnliche Schwierigkeiten bereitet uns die Interpretation der Beugungsfiguren mit ihren Maxima und Minima in der Wellenintensität. Es ist natürlich absurd anzunehmen, dass an manchen Stellen der Photoplate „*viel Elektron*“, anderswo „*wenig Elektron*“ ankommt. Die Formulierung erscheint bereits lächerlich! Aber was hat es denn nun wirklich mit dem *Wellencharakter des Teilchens* auf sich? Wir sind damit offensichtlich an einer ganz fundamentalen Frage angelangt, sodass es sinnvoll erscheint, mithilfe eines typischen *Gedankenexperiments* die gesamte Problematik noch einmal aufzuzeichnen.

2.1.3 Das Doppelspaltexperiment

Eine Welle (Materie, elektromagnetisch, ...) falle auf einen undurchlässigen Schirm S , auf dem ein Doppelspalt (S_1, S_2) angebracht ist. Auf einer Photoplate (Detektor D) hinter dem Schirm in der xy -Ebene wird die sich einstellende Strahlungsintensität registriert. Wir führen nun die folgenden Gedankenexperimente durch:

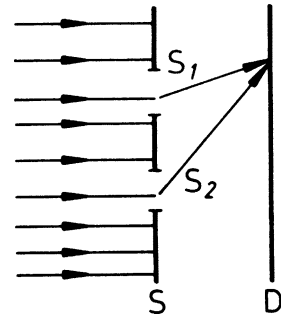
■ a) Die Quelle sendet klassische Teilchen (Kugeln, Schrotkörner, ...) aus!

Es ist durchaus möglich, dass die Teilchen in irgendeiner Form durch die Spalte S_1 und S_2 beeinflusst werden; wichtig ist jedoch, dass die von S_1 und S_2 ausgehenden Wirkungen unabhängig voneinander sind. Sind $I_{1,2}^{(a)}(x, y)$ die Intensitäten der beiden Einzelspalte, so erhält man für die Gesamtintensität das klassisch selbstverständliche Resultat:

$$I^{(a)}(x, y) = I_1^{(a)}(x, y) + I_2^{(a)}(x, y). \quad (2.23)$$

Es ergibt sich dasselbe Bild für den Fall, dass die beiden Spalte gleichzeitig geöffnet sind, wie für den Fall, dass sie gleich lange, aber nacheinander geöffnet werden.

Abb. 2.1 Anordnung zum Doppelspaltexperiment



■ b) Die Quelle sendet elektromagnetische Wellen (Licht, Röntgen,...) aus!

Das ist die Situation, die wir bereits in Abschn. 1.4 ausführlich erörtert haben. Öffnen wir die beiden Spalte nacheinander, so addieren sich die Intensitäten $I_{1,2}^{(b)}(x, y)$, die allerdings bereits durch die Beugung am Einzelspalt (1.71) geprägt sind. Öffnen wir dagegen die beiden Spalte gleichzeitig, so kommt ein weiterer Interferenzterm $I_{12}^{(b)}(x, y)$ hinzu, der positiv wie negativ sein kann:

$$I^{(b)}(x, y) = I_1^{(b)}(x, y) + I_2^{(b)}(x, y) + I_{12}^{(b)}(x, y). \quad (2.24)$$

Sind A_1 und A_2 die Amplituden der nach dem Huygens'schen Prinzip (Abschn. 1.4.1) den beiden Spalten zuzuordnenden Sekundärwellen, so ist die Intensität durch das Betragsquadrat der Amplitudensumme bestimmt:

$$I^{(b)} \sim |A_1 + A_2|^2 \neq |A_1|^2 + |A_2|^2. \quad (2.25)$$

Die genauen Intensitätsformeln sind an (1.72) bzw. an (1.73) für $N = 2$ abzulesen. Das gilt auch für die Beschriftung in Abb. 2.2.

■ c) Die Quelle sendet elektromagnetische Strahlung extrem schwacher Intensität, d. h. einzelne Photonen, aus!

Der Detektor „sieht“ Teilchen wie in a). Energie wird nur in Quanten $h\nu$ absorbiert. Allerdings erweisen sich die Auftrefforte der Photonen als nicht vorhersagbar! Sie verteilen sich zunächst ziemlich zufällig über die Photoplatte. Lässt man jedoch hinreichend viele Einzelprozesse stattfinden, so ergibt sich schließlich ein Gesamtbild, das $I^{(b)}$ entspricht. Dies erscheint paradox. In einem Gedankenexperiment können wir die Photonen wirklich nacheinander im Detektor erscheinen lassen. Trotzdem ergibt sich schließlich ein Interferenzeffekt. „Interferiert“ das Einzelphoton etwa „mit sich selbst“?

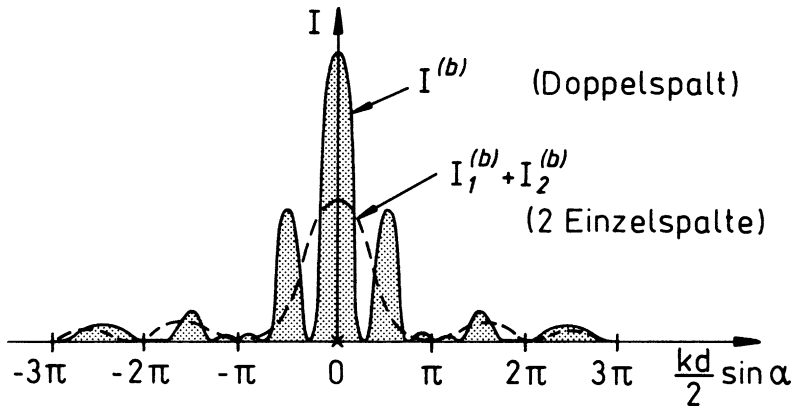


Abb. 2.2 Intensitätsverteilung beim Doppelspaltexperiment

■ d) Die Quelle sendet Teilchen (Elektronen) aus!

Diese werden einzeln als Teilchen im Detektor registriert. Wie bei den Photonen ist die Ankunft der Elektronen zufällig, d. h. nicht vorhersagbar. Die ersten, durch Elektronen bewirkten, lokalisierten Wirkungen verteilen sich scheinbar chaotisch über die Photoplate, um dann bei hinreichend großer Ereigniszahl einer Verteilung gemäß $I^{(b)}$ zu entsprechen. Demnach interferieren auch Elektronen! Die Unterschiede in den Intensitäten für nacheinander geöffnete Einzelspalte und gleichzeitig geöffnetem Doppelspalt sind dieselben wie für die elektromagnetische Strahlung in b). Wenn es uns allerdings gelingt, die Bahn des Elektrons genau zu verfolgen, also festzustellen, durch welchen Spalt das Elektron fliegt, verschwindet unmittelbar der Interferenzeffekt.

Was ist das Elektron denn nun wirklich, ein Teilchen, eine Welle oder beides? Wir wollen in Abschn. 2.2 versuchen, über eine Analyse des geschilderten Doppelspaltgedankenexperiments eine Antwort auf diese Frage zu finden.

2.1.4 Aufgaben

Aufgabe 2.1.1

Berechnen Sie die de Broglie-Wellenlänge

1. eines Elektrons der Energie $E = 1 \text{ eV}$,
2. eines Elektrons mit $E = 100 \text{ MeV}$,
3. eines thermischen Neutrons ($E \approx k_B T$; $T = 300 \text{ K}$).

Aufgabe 2.1.2

Zeigen Sie, dass die „Faustregel“ (2.20) für die de Broglie-Wellenlänge eines Elektrons bei voller Berücksichtigung relativistischer Effekte durch

$$\lambda(e^-) [\text{\AA}] \approx \frac{12,25}{\sqrt{E [\text{eV}]}} \frac{1}{\sqrt{1 + 0,978 \cdot 10^{-6} E [\text{eV}]}}$$

ersetzt werden muss.

Aufgabe 2.1.3

Ein Strahl thermischer Neutronen werde an den Netzebenen eines Kristalls reflektiert. Berechnen Sie die Ablenkungswinkel, unter denen Bragg'sche Reflexionsmaxima auftreten, wenn der Netzebenenabstand $3,5 \text{ \AA}$ beträgt.

2.2 Die Wellenfunktion

2.2.1 Statistische Interpretation

Entscheidend für die Interpretation des Doppelspaltexperiments (s. Abschn. 2.1.3) ist die Zufälligkeit des Elementarprozesses, d. h. die Unmöglichkeit, Zeit und Ort der Absorption eines Photons oder Elektrons exakt vorherzusagen. Warum das so ist, können wir nicht erklären; wir müssen es einfach als Erfahrungstatsache akzeptieren. Wenn wir es aber akzeptieren, dann müssen wir auch die *Statistik* und mit ihr den Begriff der *Wahrscheinlichkeit* als das angemessene Konzept zur Beschreibung solcher zufälliger Ereignisse ansehen. Wir kommen nicht umhin,

die Beziehung zwischen Teilchen und Welle statistisch zu deuten!

Ähnlich war die Situation eigentlich bereits bei der Rutherford-Streuung der α -Teilchen (s. Abschn. 1.2.3), bei der der Stoßparameter p nicht absolut festgelegt werden konnte, sodass notwendigerweise in die Streuformel (1.67) auch Elemente der Statistik einfließen mussten. Sie vermittelt deshalb *nur* Wahrscheinlichkeitsaussagen. Der exakte Verlauf des Streuprozesses eines einzelnen α -Teilchens ist nicht vorhersagbar.

Treffen wir nun die Zuordnung

- ▶ Materiewellen \Longleftrightarrow Wahrscheinlichkeitswellen

und lassen diese Wahrscheinlichkeitswellen wie *normale* Wellen Interferenz und Beugung erfahren, so wird, wie wir in den folgenden Kapiteln Schritt für Schritt entwickeln werden, der an sich verblüffende, häufig sogar paradox erscheinende experimentelle Befund quantitativ korrekt beschrieben. Charakterisieren wir die Welle, wie durch die Überlegungen in Abschn. 2.1.1 nahegelegt, durch eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$, so ist

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$$

als die Wahrscheinlichkeit aufzufassen, das Teilchen zur Zeit t im Volumenelement d^3r am Ort \mathbf{r} anzutreffen. Da Wahrscheinlichkeiten positiv-definite Größen sind, ist nicht die Wellenfunktion ψ selbst, sondern das Betragsquadrat ausschlaggebend. Wir werden später sehen, dass die Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi(\mathbf{r}, t)$ im Allgemeinen komplex ist. Für eine große Zahl von gleichartigen Teilchen ergibt sich dann eine Intensitätsverteilung gemäß dem Amplitudenquadrat $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Dort, wo dieses groß ist, werden zur Zeit t viele Teilchen gelandet sein; dort, wo es gleich Null ist, wird kein Teilchen anzutreffen sein. Beugungsmaxima und -minima erklären sich damit zwanglos als erhöhte bzw. verminderte Teilchendichte.

Materiewellen sind also keine spezielle physikalische Eigenschaft des Teilchens. Sie verdanken ihre Existenz dem besonderen **statistischen** Verhalten der Teilchen. Im **Einzelprozess** erscheint dagegen nur der **Teilchenaspekt**! Materiewellen besitzen in diesem Sinne keine physikalische Realität wie zum Beispiel elektromagnetische Wellen. Das war gemeint, als in Abschn. 2.1.2 davor gewarnt wurde, Materiewellen und elektromagnetische (Röntgen-) Wellen allein aufgrund vergleichbar großer Wellenlängen für physikalisch wesensverwandt zu halten.

Wir interpretieren also

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.26)$$

als *Wahrscheinlichkeitsdichte* für den zeitlich veränderlichen Aufenthaltsort des Teilchens. Anders als in der Klassischen Mechanik sind über dessen Bahn nur solche Wahrscheinlichkeitsaussagen möglich. Leiten wir $\rho(\mathbf{r}, t)$ nach der Zeit ab, so können wir mithilfe der Schrödinger-Gleichung (2.18) schreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi = \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi^* \right) \psi + \psi^* \left(\frac{\partial}{\partial t} \psi \right) = \frac{\hbar}{2mi} (\Delta \psi^* \psi - \psi^* \Delta \psi) .$$

Diese Gleichung legt die Definition einer

Wahrscheinlichkeitsstromdichte

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \{ \psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t) \} \quad (2.27)$$

nahe, mit der sich eine

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.28)$$

formulieren lässt. Sie besagt, dass die zeitliche Änderung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit in einem bestimmten Volumen gleich dem Wahrscheinlichkeitsstrom durch dessen Oberfläche ist. Es „geht“ keine Wahrscheinlichkeit „verloren“. Letztlich drückt (2.28) die Teilchenzahlerhaltung aus. Zwischen ρ und \mathbf{j} besteht derselbe Zusammenhang wie in der Elektrodynamik ((3.5), Bd. 3) zwischen der Ladungs- und der Stromdichte.

Die eigentliche Messgröße ist die reelle Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\mathbf{r}, t)$. Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ ist selbst der Messung nicht direkt zugänglich, legt aber $\rho(\mathbf{r}, t)$ eindeutig fest und ist zudem mithilfe der Schrödinger-Gleichungen (2.16) und (2.18) berechenbar. Kombiniert man (2.16) und (2.18),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.29)$$

so ergibt sich eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit. Ist also die Wellenfunktion zu irgendeinem Zeitpunkt t_0 bekannt, so ist sie bereits für *alle* Zeiten *eindeutig* bestimmt. Über die Bahn des Teilchens können zwar nur „ungenau“ Wahrscheinlichkeitsaussagen gemacht werden, die Wahrscheinlichkeit selbst ist aber durch die Schrödinger-Gleichung exakt festgelegt. Durch die Bewegungsgleichung (2.29) der Wellenfunktion wird also keine zusätzliche „Unschärfe“ ins Spiel gebracht.

Bei der Lösung von (2.29) wollen wir weiterhin zunächst nur an solche quantenmechanischen Systeme denken, die aus einem einzigen Teilchen bestehen. Das reelle Potential $V(\mathbf{r})$ enthält dann die Einflüsse aller *äußeren Kräfte* auf dieses Teilchen. Die Verallgemeinerung auf Mehr-Teilchen-Systeme wird in einem späteren Kapitel besprochen. – Wir sollten uns jedoch noch einmal in Erinnerung rufen, dass die alles entscheidende Schrödinger-Gleichung (2.29) lediglich das Ergebnis von Plausibilitätsbetrachtungen war:

Die Schrödinger-Gleichung lässt sich nicht aus ersten Prinzipien ableiten! Sie hat eher die Bedeutung eines Axioms!

Um ein gewisses Zutrauen zu ihr zu gewinnen, kann man sie induktiv über Analogieschlüsse „begründen“, wie wir es in Abschn. 2.1 versucht haben. Man könnte sie mit gleicher Berechtigung aber auch von vornherein als Grundgesetz der Wellenmechanik *postulieren*, ähnlich wie man in der Klassischen Mechanik mit den Newton'schen Axiomen verfahren ist. In jedem Fall müssen die aus (2.29) abgeleiteten theoretischen Aussagen experimentellen Fakten gegenübergestellt werden. Erst eine sich einstellende Übereinstimmung rechtfertigt den Ansatz.

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion schränkt natürlich die in Frage kommenden mathematischen Funktionen stark ein. Normiert man die Wahrscheinlichkeit wie üblich auf Eins, so muss für das Integral über den gesamten Raum

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1 \quad (2.30)$$

gefordert werden, da sich das Teilchen ja mit Sicherheit irgendwo im Raum aufhält. Weil eine Lösung der linearen Differentialgleichung (2.29) auch dann Lösung bleibt, wenn man sie mit einer Konstanten multipliziert, haben wir, etwas schwächer als (2.30),

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 < \infty \quad (2.31)$$

zu fordern. Insbesondere muss $\psi(\mathbf{r}, t)$ im Unendlichen „hinreichend rasch“ verschwinden. Als Wellenfunktionen kommen demnach nur

quadratintegrale Funktionen

in Frage.

In der Normierungsbedingung (2.30) steckt implizit die Annahme, dass die Norm zeitlich konstant ist. Das lässt sich mithilfe der Kontinuitätsgleichung (2.28) beweisen. Zunächst folgt nach Anwendung des Gauß'schen Satzes ((1.54), Bd. 3) für ein endliches Volumen V mit der Oberfläche $S(V)$:

$$\int_V d^3r \frac{\partial \rho}{\partial t} + \oint_{S(V)} \mathbf{j} \cdot d\mathbf{f} = 0.$$

Lassen wir nun V über alle Grenzen wachsen, so verschwindet das Oberflächenintegral, da bei quadratintegrablen Funktionen auch die Stromdichte \mathbf{j} (2.27) auf der im Unendlichen

liegenden Oberfläche S zu Null wird. Wegen

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (2.32)$$

ist das Normierungsintegral (2.30) in der Tat zeitunabhängig.

Wir fügen zum Abschluss unserer recht allgemeinen Überlegungen zur Wellenfunktion noch eine Zusatzbemerkung an. Es wurde bereits erwähnt, dass die im Allgemeinen komplexwertige Wellenfunktion

$$\psi(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)| \exp(i\varphi(\mathbf{r}, t))$$

nicht direkt messbar ist. Von physikalischer Bedeutung scheint nur das Betragsquadrat zu sein. Das könnte dazu verleiten, die Phase $\varphi(\mathbf{r}, t)$ für unwichtig zu halten. In vielerlei Hinsicht ist das auch gerechtfertigt; jedoch ist etwas Vorsicht geboten. Die Schrödinger-Gleichung (2.29) ist linear, d. h., mit $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ und $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ ist auch jede Linearkombination Lösung:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \alpha_1 \psi_1(\mathbf{r}, t) + \alpha_2 \psi_2(\mathbf{r}, t) \quad \alpha_{1,2} \in \mathbb{C} . \quad (2.33)$$

Natürlich kommt es in einem solchen Fall entscheidend auf die relative Phase der beiden Partiallösungen ψ_1 und ψ_2 an. Man denke nur an das Ergebnis des in Abschn. 2.1.3 diskutierten Doppelspaltexperiments.

2.2.2 Die freie Materiewelle

Wir wollen weitere Informationen über die einem Teilchen zugeordnete Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ sammeln, die offensichtlich das zentrale Bestimmungsstück bei der Lösung eines quantenmechanischen Problems darstellt. Nach den Überlegungen in Abschn. 2.2.1 ist klar, dass der Vektor \mathbf{r} im Argument von ψ nicht etwa mit der Position des Teilchens zu identifizieren ist, sondern lediglich einen Raumpunkt kennzeichnet. Messbar ist die Wellenfunktion nur in Form der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte (2.26).

Wir beginnen mit dem einfachsten Fall, der Wellenfunktion eines freien Teilchens. *Frei* bedeutet dabei, dass auf das Teilchen keinerlei Kräfte einwirken. Es besitzt somit keine potentielle Energie $V(\mathbf{r}) \equiv 0$. Der Hamilton-Operator \hat{H}_0 des freien Teilchens lautet damit nach (2.16):

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} . \quad (2.34)$$

Man erkennt dann unmittelbar, dass die ebene Welle (s. Abschn. 4.3.2, Bd. 3),

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = \alpha e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} , \quad (2.35)$$

die Schrödinger-Gleichung (2.29) erfüllt, wenn nur

$$E = \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \iff \omega = \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (2.36)$$

gilt. Schwierigkeiten macht die Normierung der Wellenfunktion (2.35). $\psi_0(\mathbf{r}, t)$ ist ersichtlich **nicht** quadratintegrierbar. Man hilft sich hier mit der Vorstellung, dass sich das freie Teilchen mit Sicherheit irgendwo in dem im Prinzip beliebig großen, aber endlichen Volumen V aufhält, und fordert:

$$\int_V d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1. \quad (2.37)$$

Man beachte, dass hier nicht über den ganzen Raum, sondern nur über das endliche Volumen V integriert wird. (2.37) hat für die Normierungskonstante α in (2.35)

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{V}} \quad (2.38)$$

zur Folge (s. auch Abschn. 2.2.5).

Ebene Wellen sind raum-zeitlich periodische Gebilde, deren Phase,

$$\varphi = \varphi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t, \quad (2.39)$$

für feste Zeiten t Ebenen definiert. Diese bestehen aus all den Punkten, für die die Projektion des Ortsvektors \mathbf{r} auf die Richtung von \mathbf{k} denselben Wert hat. Für eine feste Zeit $t = t_0$ wiederholen sich Ebenen gleicher Wellenamplitude $\psi_0(\mathbf{r}, t_0)$ periodisch im Raum. Die Wellenlänge λ ist definiert als der senkrechte Abstand zweier solcher Ebenen:

$$\Delta\varphi = \Delta(\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}) \stackrel{!}{=} 2\pi \iff \lambda = \frac{\Delta(\mathbf{r} \cdot \mathbf{k})}{k} = \frac{2\pi}{k}. \quad (2.40)$$

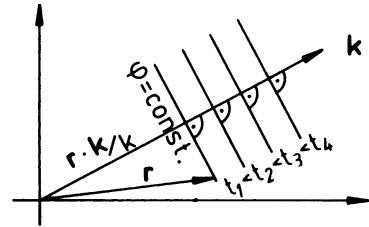
Mit (2.14) und (2.36) folgt daraus:

$$p = \hbar k; \quad E = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.41)$$

Das ist die aus der Klassischen Mechanik bekannte Energie-/Impulsbeziehung des nicht-relativistischen, freien Teilchens.

Hält man dagegen den Ort fest, so wiederholt sich die Wellenamplitude mit der zeitlichen Periode:

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{1}{\nu} \iff \omega = 2\pi\nu. \quad (2.42)$$

Abb. 2.3 Propagation einer ebenen Welle

Ebenen konstanter Phase verlagern sich mit der Phasengeschwindigkeit u in Richtung von \mathbf{k} :

$$u = \frac{d}{dt} \left(\mathbf{r} \cdot \frac{\mathbf{k}}{k} \right) = \frac{d}{dt} \left[\frac{1}{k} (\omega(k) t + \text{const}) \right]$$

$$\Rightarrow u = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}. \quad (2.43)$$

Diese Geschwindigkeit tritt im Experiment mit Materiestrahlen ebenso wenig in Erscheinung wie die Frequenz ω . Wichtiger ist – warum, wird sehr bald klar werden – die *Gruppengeschwindigkeit* v_g , die bei der ebenen Welle mit der Teilchengeschwindigkeit identisch ist:

$$\mathbf{v}_g(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(k) = v_g(k) \mathbf{e}_k; \quad \mathbf{e}_k = \frac{\mathbf{k}}{k}, \quad (2.44)$$

$$v_g(k) = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = v. \quad (2.45)$$

Die ebene Welle $\psi_0(\mathbf{r}, t)$ ist nach (2.35), (2.36) durch einen festen Wellenvektor \mathbf{k} charakterisiert, dessen Richtung der Ausbreitungsrichtung der Welle entspricht, während sein Betrag die Materiewellenlänge λ eindeutig bestimmt. Nun können andererseits Wellenlängen sowohl für elektromagnetische Wellen als auch für Materiewellen im Prinzip beliebig genau gemessen werden. Wird dem Teilchen also eine ebene Welle zugeordnet, so ist über eine Wellenlängenmessung mit (2.40), (2.41) der Impuls des Teilchens exakt bestimmt. Dafür können wir aber offensichtlich über den Ort des Teilchens überhaupt keine Aussage machen. Infolge

$$\rho_0(\mathbf{r}, t) = |\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \equiv \frac{1}{V} \quad (2.46)$$

ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für alle Raumpunkte dieselbe. Durch die streng harmonische, ebene Welle ist in der Tat kein Punkt des Raumes besonders ausgezeichnet. Wir kommen nicht umhin festzustellen, dass die exakte Bestimmungsmöglichkeit für den Impuls die völlige Unkenntnis über die konjugierte Variable *Ort* zur Folge hat. Das deckt sich, als Spezialfall, mit der Heisenberg'schen Unbestimmtheitsrelation (1.5), die uns im Folgenden immer wieder beschäftigen wird.

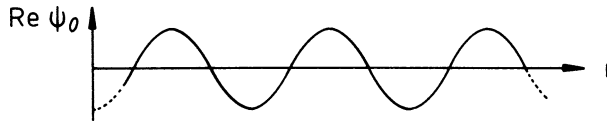


Abb. 2.4 Periodische Ortsabhängigkeit des Realteils der ebenen Welle

Nun ist es aber unbestreitbar unter gewissen Umständen möglich, den Teilchenort, wenn schon nicht exakt, so doch zumindest auf einen endlichen Raumbereich festzulegen. Das erfordert aber offensichtlich eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$, die einem endlichen Wellenzug entspricht. Aus der Fourier-Theorie wissen wir, dass man durch Superposition von ebenen Wellen Wellenzüge beliebiger Gestalt realisieren kann, da die ebenen Wellen ein sogenanntes vollständiges Funktionensystem (s. Abschn. 2.3.5, Bd. 3) bilden. Hinzu kommt, dass wegen der Linearität der Wellengleichung (2.29) neben den ebenen Wellen auch jede Linearkombination derselben eine mögliche Lösung für das freie Teilchen darstellt. Setzen wir die allgemeine Superposition

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d\omega \int d^3k \hat{\psi}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (2.47)$$

in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (2.18) ein, so folgt mit dem Hamilton-Operator (2.34) des freien Teilchens:

$$\int d\omega \int d^3k \hat{\psi}(\mathbf{k}, \omega) \left(\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} = 0.$$

Diese Gleichung erfordert

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}, \omega) = \hat{\psi}(\mathbf{k}) \delta(\omega - \omega(k)) \quad (2.48)$$

mit $\omega(k)$ wie in (2.36). „Schnüren“ wir also ebene Wellen zu *Wellenpaketen* der Form

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3k \hat{\psi}(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(k)t)}, \quad (2.49)$$

so sind wir sicher, dass es sich um Lösungen der Schrödinger-Gleichung handelt, wobei andererseits über die Amplitudenfunktion $\hat{\psi}(\mathbf{k})$ noch frei verfügt werden kann. Wir können durch passende Wahl von $\hat{\psi}(\mathbf{k})$ durchaus erreichen, dass $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ nur in einem kleinen Raumbereich merklich von Null verschieden ist. Wird dem Teilchen eine Wellenfunktion solchen Typs zugeordnet, so ist sein Ort offensichtlich nicht mehr völlig unbestimmt. Andererseits ist aber auch der Impuls nun nicht mehr exakt bekannt, da zum Aufbau des Wellenpakets mehrere ebene Wellen unterschiedlicher Wellenlänge $\lambda = 2\pi/k$ benötigt werden. Auch dieser Sachverhalt bestätigt, zumindest qualitativ, die Unbestimmtheitsrelation (1.5).

2.2.3 Wellenpakete

Wir wollen uns noch etwas eingehender mit den Wellenpaketen (2.49) befassen. Nehmen wir einmal an, die Amplitudenfunktion $\widehat{\psi}(\mathbf{k})$ konzentriere sich im Wesentlichen um den festen Vektor \mathbf{k}_0 , habe dort zum Beispiel ein ausgeprägtes Maximum. Dann wird der Wert des Integrals (2.49) vor allem durch solche Wellenzahlen bestimmt, die sich nicht allzu sehr von \mathbf{k}_0 unterscheiden. Wir werden deshalb im Integranden von (2.49) ohne großen Fehler eine Taylor-Entwicklung von $\omega(k)$ um $\omega(k_0)$ nach dem linearen Term abbrechen können:

$$\begin{aligned}\omega(\mathbf{k}) &= \omega(k_0) + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \nabla_k \omega(k)|_{k_0} + \dots = \\ &= \omega(k_0) + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{v}_g(k_0) + \dots\end{aligned}\quad (2.50)$$

Damit nimmt das Wellenpaket (2.49) die folgende Gestalt an:

$$\psi(\mathbf{r}, t) \approx e^{i(k_0 \cdot \mathbf{r} - \omega(k_0)t)} \widetilde{\psi}_{k_0}(\mathbf{r}, t). \quad (2.51)$$

Das Herausheben der Wellenzahl \mathbf{k}_0 darf auf keinen Fall so missverstanden werden, dass auch dem Wellenpaket eine bestimmte Wellenlänge zuzuordnen sei. Es handelt sich natürlich in Wirklichkeit um einen komplizierten, aus verschiedenen Partialwellen zusammengesetzten Vorgang. Das manifestiert sich in der Modulationsfunktion:

$$\widetilde{\psi}_{k_0}(\mathbf{r}, t) = \int d^3q \widehat{\psi}(\mathbf{q} + \mathbf{k}_0) \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{v}_g(k_0)t)). \quad (2.52)$$

Die an sich unbedeutende Phasengeschwindigkeit des Wellenpakets bestimmt sich genau wie in (2.43) zu:

$$u = \frac{d}{dt}(\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_{k_0}) = \frac{\omega(k_0)}{k_0}. \quad (2.53)$$

Die Modulationsfunktion definiert dagegen für

$$\mathbf{r} - \mathbf{v}_g(k_0)t = \text{const}.$$

Flächen konstanter Amplitude, die sich mit der Geschwindigkeit

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_g(k_0) = \nabla_k \omega(k)|_{k_0} \quad (2.54)$$

fortpflanzen. Das ist ebenso die Verschiebungsgeschwindigkeit des gesamten Pakets und damit letztlich die Geschwindigkeit, mit der durch das Wellenpaket Information transportiert werden kann. Nach den Gesetzen der Speziellen Relativitätstheorie (Band 4) muss deshalb stets $v_g \leq c$ sein; eine Beschränkung, der die Phasengeschwindigkeit u nicht unterliegt.

2.2 Die Wellenfunktion

Abb. 2.5 Typischer Verlauf der Amplitudenfunktion eines Wellenpakets

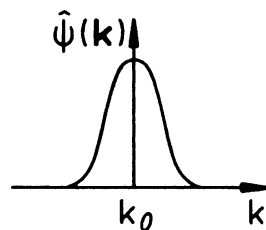
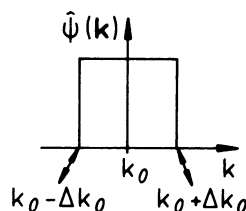


Abb. 2.6 Einfaches Beispiel für eine Amplitudenfunktion eines eindimensionalen Wellenpakets



Wir wollen uns den gesamten Sachverhalt noch einmal an einem einfachen *eindimensionalen* Beispiel, so wie in Abb. 2.6 skizziert, veranschaulichen:

Die Ausbreitungsrichtung des Wellenpakets sei die z -Richtung. Die Amplitudenfunktion $\hat{\psi}(k)$ soll stückweise konstant sein:

$$\hat{\psi}(k) = \begin{cases} \hat{\psi}(k_0), & \text{falls } k_0 - \Delta k_0 \leq k \leq k_0 + \Delta k_0, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.55)$$

Damit lässt sich die Modulationsfunktion,

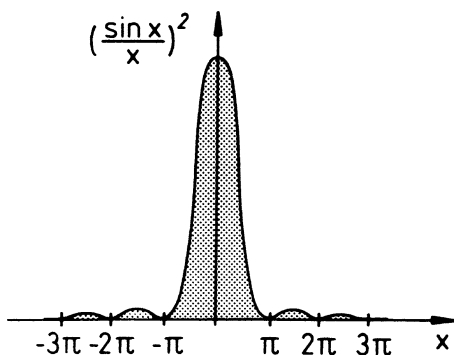
$$\tilde{\psi}_{k_0}(z, t) = \hat{\psi}(k_0) \int_{-\Delta k_0}^{+\Delta k_0} dq \exp[iq(z - v_g(k_0)t)],$$

leicht berechnen:

$$\tilde{\psi}_{k_0}(z, t) = 2\hat{\psi}(k_0) \Delta k_0 \frac{\sin[\Delta k_0(z - v_g t)]}{\Delta k_0(z - v_g t)}. \quad (2.56)$$

Es handelt sich also um eine Funktion vom Typ $\sin x/x$. Nach unseren Überlegungen in Abschn. 2.2.1 ist nur das Betragsquadrat $|\tilde{\psi}_{k_0}|^2 \sim (\sin x/x)^2$ von physikalischer Bedeutung. Dieses besitzt ein Hauptmaximum bei $x = 0$ mit dem Funktionswert 1 und Nullstellen bei $x = \pm n\pi$; $n = 1, 2, \dots$ Zwischen diesen Nullstellen liegen Nebenmaxima bei den x -Werten, für die $\tan x = x$ gilt. Diese befinden sich zwischen $n\pi$ und $(n + 1/2)\pi$, mit wachsendem n immer dichter bei $(n + 1/2)\pi$. Das erste Nebenmaximum weist allerdings nur noch den Funktionswert 0,047 auf. Mit weiter wachsendem $|x|$ werden die Nebenmaxima im Vergleich zum Hauptmaximum rasch noch kleiner. Mit einem Fehler geringer als 5 % ist die Fläche unter der Kurve $(\sin x/x)^2$ auf das Intervall von $-\pi$ bis $+\pi$ beschränkt. Damit sorgt

Abb. 2.7 Qualitativer Verlauf der Funktion $(\sin x/x)^2$ als Funktion von x



die Amplitudenfunktion $\widehat{\psi}(k)$ aus (2.55) ganz offensichtlich für die Realisation eines Wellenpakets.

Das Maximum des Wellenpakets,

$$\psi(z, t) = 2\widehat{\psi}(k_0) \Delta k_0 \frac{\sin[\Delta k_0(z - v_g t)]}{\Delta k_0(z - v_g t)} \exp[i(k_0 z - \omega(k_0) t)] , \quad (2.57)$$

liegt bei

$$z_m(t) = v_g t \quad (2.58)$$

und verschiebt sich mit der Geschwindigkeit v_g in die positive z -Richtung. Obwohl durch die Darstellung (2.57) die Wellenlänge $\lambda_0 = 2\pi/k_0$ und die Frequenz $\omega(k_0)$ gegenüber anderen Wellenlängen und Frequenzen besonders hervorgehoben zu sein scheinen, haben wir es dennoch nach Konstruktion (2.55) in Wirklichkeit mit einem aus vielen Wellenlängen zusammengesetzten Vorgang zu tun. Das entspricht genau dem Resultat unserer früheren allgemeinen Überlegungen im Anschluss an (2.51).

Es ist recht aufschlussreich, sich zu überlegen, mit welcher Genauigkeit der Aufenthaltsort eines durch die Wellenfunktion (2.57) beschriebenen Teilchens zu einer festen Zeit, zum Beispiel $t = 0$, angegeben werden kann. Wie oben diskutiert, ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(z, t = 0)|^2$ im Wesentlichen auf das Intervall

$$-\pi \leq \Delta k_0 z \leq +\pi$$

konzentriert. Die effektive Breite Δz des Wellenpakets erfüllt somit die Relation

$$\Delta k_0 \Delta z = 2\pi . \quad (2.59)$$

Wenn wir die Wellenzahl mit \hbar multiplizieren, so ergibt sich der Teilchenimpuls. Die Gleichung besagt dann, dass das Produkt aus Orts- und Impulsunschärfe nicht beliebig klein gemacht werden kann. Unter diesem Aspekt stellt die ebene Welle offensichtlich einen

2.2 Die Wellenfunktion

Grenzfall dar. Sie besitzt eine scharf definierte Wellenzahl (*monochromatisch*), was einem $\Delta k_0 = 0$ entspricht. Andererseits ist sie aber auch unendlich ausgedehnt ($\Delta z \rightarrow \infty$), sodass sich insgesamt kein Widerspruch zu (2.59) ergibt. – Durch (2.59) wird erneut, zumindest qualitativ, die Heisenberg'sche Unbestimmtheitsrelation (1.5) bestätigt.

Eine wichtige Eigentümlichkeit der Wellenpakete ist ihr Auseinanderlaufen (*Breitfließen*), das in den Aufgaben 2.2.2 und 2.2.3 an einem prominenten Beispiel, dem *Gauß'schen Wellenpaket*, im Detail untersucht wird. Wir sind bisher davon ausgegangen, dass die Entwicklung in (2.50) von $\omega(k)$ um $\omega(k_0)$ nach dem linearen Term abgebrochen werden kann. In der Tat bleiben für $\nabla^2 \omega \equiv 0$ alle bisher getroffenen Aussagen gültig. Ist jedoch $\nabla^2 \omega \neq 0$, so besitzen offensichtlich die verschiedenen ebenen Partialwellen, aus denen das Paket geschnürt wurde, unterschiedliche Phasengeschwindigkeiten:

$$u = \frac{\omega(k)}{k} = u(k) . \quad (2.60)$$

Die Wellenzahlabhängigkeit von u bezeichnet man als *Dispersion*. Die schnellen Partialwellen eilen voraus, die langsamen bleiben zurück. Zum Zeitpunkt $t = 0$ existierende Phasenbeziehungen sind schon im nächsten Moment nicht mehr gültig. Das Paket kann somit seine Form nicht beibehalten. Man sagt: „Es zerfließt!“ Für das freie Teilchen ist nach (2.36) u auf jeden Fall wellenzahlabhängig ($u \sim k$). Entsprechende Materiewellenpakete müssen also zerfließen. Bei fehlender Dispersion sind Phasen- und Gruppengeschwindigkeit identisch. Das gesamte Paket verschiebt sich dann mit exakt derselben Geschwindigkeit wie jede einzelne Partialwelle. Diese Situation liegt bei elektromagnetischen Wellen vor ($\omega = ck$). Aus ihnen aufgebaute Wellenpakete, wie sie beim Radar zur Ortung benutzt werden, fließen deshalb **nicht** breit. Liegt dagegen, wie bei Materiewellen, Dispersion vor, so kann die dann ebenfalls wellenzahlabhängige Gruppengeschwindigkeit,

$$v_g(k) = \frac{d\omega}{dk} = u(k) + k \frac{du}{dk} , \quad (2.61)$$

sowohl kleiner (*normale Dispersion*) als auch größer (*anomale Dispersion*) als u sein.

Nachdem wir uns die Ursache des Breitfließens der Wellenpakete bereits plausibel gemacht haben, wollen wir die Bedingung für das Nicht-Zerfließen noch einmal ganz formal ableiten. Das machen wir der Einfachheit halber weiter für das eindimensionale Wellenpaket. Wenn sich das Paket in der Zeit t als Ganzes um die Strecke $z_0(t)$ verschiebt, sich dabei aber nicht deformiert, so muss offenbar gelten:

$$|\psi(z, t)|^2 \stackrel{!}{=} |\psi(z - z_0(t), 0)|^2 .$$

Nach (2.49) ist also zu fordern:

$$\int dk \int dk' \widehat{\psi}(k) \widehat{\psi}^*(k') e^{i(k-k')z} \left\{ e^{-i(\omega(k) - \omega(k'))t} - e^{-i(k-k')z_0(t)} \right\} \stackrel{!}{=} 0 .$$

Substituieren wir k' durch $k + p$, so reduziert sich diese Bedingung auf:

$$\int dk \widehat{\psi}(k) \widehat{\psi}^*(k+p) \left\{ e^{-i(\omega(k) - \omega(k+p))t} - e^{ipz_0(t)} \right\} \stackrel{!}{=} 0.$$

Wenn dies für beliebige Gewichtsfunktionen $\widehat{\psi}$ gültig sein soll, so muss

$$[\omega(k+p) - \omega(k)] \stackrel{!}{=} p z_0(t)$$

angenommen werden, und damit, weil die linke Seite nicht von k abhängen darf,

$$\omega(k) \stackrel{!}{=} \alpha k.$$

Eine im Prinzip noch denkbare additive Konstante kann durch passende Energienormierung zu Null gemacht werden. Für das Nicht-Zerfließen des Wellenpakets ist also, wie erwartet, zu fordern, dass Phasen- und Gruppengeschwindigkeit identisch sind:

$$\frac{\omega(k)}{k} \stackrel{!}{=} \frac{d\omega(k)}{dk}. \quad (2.62)$$

Ist diese Bedingung nicht erfüllt, so läuft das Wellenpaket unweigerlich auseinander, und zwar umso schneller, je schärfer das Paket bei $t = 0$ „geschnürt“ war. Die Fourier-Analyse besagt, dass zum Aufbau eines Wellenpakets umso mehr ebene Partialwellen benötigt werden, je stärker die örtliche Konzentration des Pakets sein soll. Im Einklang mit der Unbestimmtheitsrelation (1.5) ist die Impulsunschärfe bei $t = 0$ also umso größer, je genauer der Teilchenort festgelegt werden kann. Wegen der größeren Impulsunschärfe ist dann aber auch der künftige ($t > 0$) Ort des Teilchens umso weniger genau angebbar, je exakter er zur Zeit $t = 0$ bekannt war. Das den Wellenpaketen eigentümliche Breitfließen lässt sich demnach über die Unbestimmtheitsrelation verstehen. Das weiter oben gerechnete Beispiel (2.55) eines Wellenpakets bestätigt mit (2.59) diese Feststellung.

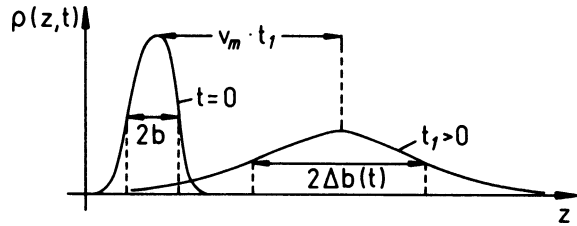
Wir rechnen in Aufgabe 2.2.2 ein spezielles Materiewellenpaket, das zur Zeit $t = 0$ die Form einer *Gauß-Glocke* hat:

$$\psi(z, 0) = (\pi b^2)^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{z^2}{2b^2}\right) \exp(ik_0 z). \quad (2.63)$$

Dieses entwickelt sich mit der Zeit, wobei die Wahrscheinlichkeitsdichte zu allen späteren Zeiten t stets die Gestalt einer Gauß-Kurve beibehält:

$$\rho(z, t) = |\psi(z, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta b(t)} \exp\left[-\frac{\left(z - \frac{\hbar k_0}{m} t\right)^2}{(\Delta b(t))^2}\right]. \quad (2.64)$$

Abb. 2.8 Illustration des Breitfließens am Beispiel des Gauß'schen Wellenpakets



Das Maximum der Glocke liegt offenbar bei

$$z_m(t) = \frac{\hbar k_0}{m} t$$

und verschiebt sich mit der Geschwindigkeit $v_m = \hbar k_0/m$. Dabei ändert sich die Breite $2\Delta b(t)$ der Glocke gemäß:

$$\Delta b(t) = \frac{1}{b} \sqrt{b^4 + \left(\frac{\hbar}{m} t\right)^2}. \quad (2.65)$$

Als Breite verstehen wir hier den Abstand der Punkte, bei denen der Funktionswert der Gauß-Glocke auf den e-ten Teil des Maximums,

$$\rho(z_m, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta b(t)}, \quad (2.66)$$

abgenommen hat (s. Abb. 2.8). Höhe und Breite des Pakets ändern sich so mit der Zeit, dass die Fläche unter der ρ -Kurve für alle t auf Eins normiert bleibt. Nach der Zeit

$$t_d = \sqrt{3} \frac{m}{\hbar} b^2 \quad (2.67)$$

hat sich die Anfangsbreite des Pakets ($2\Delta b(0) = 2b$) gerade verdoppelt. Für ein Teilchen der Masse $m = 1 \text{ g}$ mit $b = 1 \text{ mm}$ verdoppelt sich die Paketbreite in $1,642 \cdot 10^{25} \text{ s}$, d. h. in etwa $5,2 \cdot 10^{17}$ Jahren. Für ein Elektron beträgt dagegen bei einer Anfangsbreite von $b = 0,5 \text{ \AA}$ t_d nur noch etwa $3,74 \cdot 10^{-17} \text{ s}$. – Es ist nach unserer Diskussion in Abschn. 2.2.1 jedoch klar, dass das Breitfließen des Elektronenwellenpakets nicht etwa als *Zerplatzen* des Elektrons interpretiert werden darf. Lediglich die Unsicherheit in der Ortsangabe weitet sich mit der Zeit aus. $\rho(\mathbf{r}, t)$ macht natürlich keine Aussage über die *Struktur* des Teilchens.

2.2.4 Wellenfunktion im Impulsraum

In Abschn. 2.2.1 haben wir die statistische Interpretation der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ untersucht. Das wichtigste Ergebnis bestand darin, dass das Betragsquadrat der Wellenfunktion

Wahrscheinlichkeitsaussagen über die Teilchenposition ermöglicht. Genauso wichtig und interessant ist es natürlich, die entsprechende Wahrscheinlichkeitsverteilung für die konjugierte Variable *Impuls* zu kennen. Wie in (2.26) für die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum, so sollte es einen analogen Ausdruck,

$$w(\mathbf{p}, t) d^3p = |\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 d^3p, \quad (2.68)$$

geben, der die Wahrscheinlichkeit dafür darstellt, dass das Teilchen zur Zeit t einen Impuls im Volumenelement d^3p bei \mathbf{p} im Impulsraum hat. Auch diese Wahrscheinlichkeit wollen wir durch das Betragsquadrat einer entsprechenden Wellenfunktion $\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)$ darstellen. Es muss sich dann notwendig wieder um eine quadratintegrale Funktion handeln, um

$$\int d^3p |\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2 = 1 \quad (2.69)$$

zu gewährleisten. Dahinter steckt die triviale Aussage, dass das Teilchen mit Sicherheit irgendeinen Impuls hat. Kombinieren wir nun (2.69) mit (2.30),

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \int d^3p |\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2, \quad (2.70)$$

so werden wir an das Parseval-Theorem der Fourier-Transformation erinnert, das wir als Aufgabe 4.3.5 in Band 3 dieses **Grundkurs: Theoretische Physik** bewiesen haben. Es besagt, dass die Normierung einer Funktion bei Fourier-Transformation erhalten bleibt. Es liegt deshalb nahe, $\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)$ mit der Fourier-Transformierten der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ zu identifizieren (s. Abschn. 4.3.6, Bd. 3):

Definition 2.2.1

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \bar{\psi}(\mathbf{p}, t), \quad (2.71)$$

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.72)$$

Beide Funktionen ψ und $\bar{\psi}$ sind völlig äquivalent, die eine bestimmt jeweils die andere. Sowohl ψ als auch $\bar{\psi}$ eignen sich zur Beschreibung des Teilchenzustands. Wir bezeichnen sie deshalb beide als *Wellenfunktionen*. – Der Ansatz (2.71) ist in Einklang mit unseren Überlegungen aus Abschn. 2.2.3 über die freien Materiewellen und die aus diesen aufgebauten Wellenpakete. $\psi(\mathbf{r}, t)$ erscheint als Linearkombination von gewichteten ebenen Wellen, wobei die Fourier-Transformierte $\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)$ bis auf einen unbedeutenden Vorfaktor und die Zeitabhängigkeit mit der in (2.49) benutzten Amplitudenfunktion übereinstimmt.

2.2 Die Wellenfunktion

Die Identifikation der (2.68) und (2.69) erfüllenden Impulswellenfunktion mit der Fourier-Transformierten von $\psi(\mathbf{r}, t)$ muss allerdings erneut als *plausible Spekulation* eingestuft werden, die sich jedoch bislang als widerspruchsfrei zum Experiment erwiesen hat. Messbar sind die Wahrscheinlichkeitsdichten $\rho(\mathbf{r}, t)$ und $w(\mathbf{p}, t)$, die über (2.70) miteinander verknüpft sind. Dass (2.70) von (2.71) und (2.72) erfüllt wird, beweist man leicht durch Einsetzen mithilfe der Fourier-Darstellung der δ -Funktion ((4.189), Bd. 3):

Definition 2.2.2

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \, e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} , \quad (2.73)$$

$$\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \, e^{-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\cdot\mathbf{r}} . \quad (2.74)$$

2.2.5 Periodische Randbedingungen

Wir wollen in diesem Abschnitt eine Zwischenbemerkung zur Quadratintegrierbarkeit (2.31) der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ einschieben. Wir hatten bereits bei der ebenen Welle (2.35) gesehen, dass diese nicht immer erfüllbar ist. Man hilft sich dann häufig mit der Annahme, dass die Wellenfunktion stattdessen auf einem Grundvolumen periodisch ist. Wenn dieses zum Beispiel ein Quader mit den Kantenlängen L_x, L_y, L_z ist ($V = L_x L_y L_z$), dann bedeutet diese Periodizität:

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x + L_x, y, z, t) = \psi(x, y + L_y, z, t) = \psi(x, y, z + L_z, t) . \quad (2.75)$$

Dies impliziert zwar, dass sich die Ereignisse im Grundvolumen außerhalb desselben periodisch wiederholen, was nicht notwendig der Realität entsprechen muss. Andererseits ist für Ereignisse in atomaren Dimensionen diese *fehlerhafte* Annahme völlig ohne Auswirkungen, falls L_x, L_y, L_z nur hinreichend groß, zum Beispiel im Zentimeterbereich, gewählt werden. Der Schluss auf (2.32) zum Beispiel benutzt dann nicht mehr das Verschwinden der Wellenfunktion auf der Oberfläche $S(V)$, sondern die Tatsache, dass sich wegen der Periodizität (2.75) nicht-verschwindende Teilbeiträge auf der Oberfläche des Periodizitätsvolumens gerade kompensieren.

Die Annahme periodischer Randbedingungen (2.75) hat zur Folge, dass der Impuls \mathbf{p} nicht mehr beliebige, kontinuierliche Werte annehmen kann, sondern diskret und damit abzählbar wird. (2.75) lässt sich von (2.72) nur für

$$p_{x,y,z} = n_{x,y,z} \frac{2\pi\hbar}{L_{x,y,z}} ; \quad n_{x,y,z} \in \mathbb{Z} \quad (2.76)$$

erfüllen. Das ergibt im Impulsraum ein Rastervolumen

$$\Delta^3 p = \frac{(2\pi\hbar)^3}{L_x L_y L_z} = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V}, \quad (2.77)$$

in dem sich genau ein *erlaubter* Impulswert befindet. Diese Diskretisierung bietet häufig beträchtliche rechentechnische Vorteile, sodass man periodische Randbedingungen oft unabhängig von der obigen Zielsetzung allein aus solchen Zweckmäßigkeitsgründen einsetzt. Die *willkürliche* Annahme (2.75) stellt einen *Oberflächeneffekt* dar, der umso unbedeutender wird, je größer das Periodizitätsvolumen ist (*thermodynamischer Limes*, s. Bd. 6). Für $L_{x,y,z} \rightarrow \infty$ werden die physikalischen Aussagen der betreffenden Auswertung durch (2.75) nicht verfälscht.

Aus dem Fourier-Integral (2.71) wird wegen (2.76) eine Summe:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}}(t) e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}. \quad (2.78)$$

Das Betragsquadrat $|c_{\mathbf{p}}(t)|^2$ der Koeffizienten übernimmt nun die Rolle von $|\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2$:

$$c_{\mathbf{p}}(t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.79)$$

$|c_{\mathbf{p}}(t)|^2$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Teilchen zur Zeit t den (diskreten) Impuls \mathbf{p} besitzt.

Aus der δ -Funktion $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ (2.74) muss bei diskreten Impulsen (2.76) ein Kronecker-Delta werden:

$$\delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} = \frac{1}{V} \int_V d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}}. \quad (2.80)$$

Den Beweis dazu führen wir als Aufgabe 2.2.9. Die andere δ -Funktion (2.73) erhalten wir aus einer Impulssummation im Grenzfall $V \rightarrow \infty$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{\mathbf{p}} \Delta^3 p e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \\ \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (2.81)$$

Wir werden in den folgenden Kapiteln noch häufig auf periodische Randbedingungen zurückgreifen und uns dabei von ihrer Nützlichkeit überzeugen können.

2.2.6 Mittelwerte, Schwankungen

Die Wahrscheinlichkeitsdichten $\rho(\mathbf{r}, t)$ und $w(\mathbf{p}, t)$ stellen die eigentlich messbaren Aussagen der Quantenmechanik über Ort und Impuls eines Teilchens dar. Das unterscheidet sich grundsätzlich von der Teilchencharakterisierung in der Klassischen Mechanik, die dem Teilchen exakte Werte für Ort und Impuls zuschreibt. In gewisser Weise kann man die Klassische Mechanik als den Grenzfall auffassen, bei dem die Wahrscheinlichkeitsdichten ρ und w zu scharfen δ -Funktionen werden bzw. in guter Näherung als solche aufgefasst werden können.

Was können wir nun weiter an physikalischen Aussagen mithilfe von $\rho(\mathbf{r}, t)$ und $w(\mathbf{p}, t)$ formulieren? Wir können den Teilchenort zwar nicht exakt voraussagen, kennen aber für jeden *denkbaren* Messwert \mathbf{r} die Wahrscheinlichkeit, mit der eine Einzelmessung diesen Wert ergeben würde. Viele Einzelmessungen nacheinander an ein und demselben Teilchen oder gleichzeitig an vielen, durch dieselbe Wellenfunktion beschriebenen, äquivalenten Teilchen, sollten dann einen *Mittelwert* $\langle \mathbf{r} \rangle$ liefern, der sich als Summe (Integral) über die mit der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens gewichteten Einzelwerte berechnet.

$$\langle \mathbf{r} \rangle_t = \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.82)$$

Diese Definition setzt voraus, dass ψ normiert ist. Die symmetrische Schreibweise im rechten Teil der Gleichung wurde bewusst so gewählt. Der Grund wird sehr bald klar werden. Mittelwerte werden in der Quantenmechanik in der Regel *Erwartungswerte* genannt.

Ganz analog werden wir den Erwartungswert einer allgemeineren Teilcheneigenschaft $A(\mathbf{r})$ definieren,

$$\langle A(\mathbf{r}) \rangle_t = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) A(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.83)$$

der sich natürlich mit der Zeit ändern kann, selbst dann, wenn $A = A(\mathbf{r})$ nicht explizit zeitabhängig ist.

Neben dem Mittelwert einer Verteilung von Messwerten ist noch die Breite der Verteilung eine wichtige Kenngröße. In der elementaren Fehlerrechnung kennzeichnet man solche Breiten durch das *Schwankungsquadrat*,

$$\begin{aligned} \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) (A(\mathbf{r}) - \langle A(\mathbf{r}) \rangle_t)^2 &= \left\langle (A(\mathbf{r}) - \langle A(\mathbf{r}) \rangle_t)^2 \right\rangle_t \\ &= \langle A^2(\mathbf{r}) \rangle_t - \langle A(\mathbf{r}) \rangle_t^2, \end{aligned}$$

das angibt, wie stark im Mittel ein gefundener Messwert von seinem Mittelwert abweichen wird. Da die Abweichung *nach oben* und *nach unten* erfolgen kann, entsprechende Beiträge sich beim Aufsummieren ganz oder teilweise kompensieren könnten, ist es sinnvoll, die

quadratischen Abweichungen zu betrachten. Als *mittlere quadratische Schwankung* definiert man die positive Wurzel aus dem Schwankungsquadrat:

$$\Delta A_t = \sqrt{\left\langle \left(A(\mathbf{r}) - \langle A(\mathbf{r}) \rangle_t \right)^2 \right\rangle} = \sqrt{\langle A^2(\mathbf{r}) \rangle_t - \langle A(\mathbf{r}) \rangle_t^2}. \quad (2.84)$$

Kommen wir nun zum Erwartungswert des Impulses:

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = \int d^3p \, w(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} = \int d^3p \, \bar{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} \bar{\psi}(\mathbf{p}, t). \quad (2.85)$$

Diese Definition begründet sich auf dieselbe Weise wie die für $\langle \mathbf{r} \rangle$ in (2.82), insbesondere wenn man an die völlige Gleichberechtigung der Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r}, t)$ und $\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)$ denkt. Dies überträgt sich auf die Erwartungswerte allgemeinerer Teilcheneigenschaften $B(\mathbf{p})$:

$$\langle B(\mathbf{p}) \rangle_t = \int d^3p \, \bar{\psi}^*(\mathbf{p}, t) B(\mathbf{p}) \bar{\psi}(\mathbf{p}, t). \quad (2.86)$$

Nun wissen wir allerdings aus der Klassischen Mechanik, dass eine Messgröße (*Observable*) im Allgemeinen sowohl vom Ort als auch vom Impuls des Teilchens abhängt: $F = F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Die Frage ist, wie wir in einem solchen Fall zu mitteln haben. Dieses werden wir im nächsten Kapitel untersuchen.

2.2.7 Aufgaben

Aufgabe 2.2.1

Für die Wellenfunktion eines Elektrons der Masse m gelte

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \frac{1}{(\pi b^2(t))^{3/2}} \exp\left(-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t)^2}{b^2(t)}\right)$$

mit

$$b(t) = b \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 b^4}}.$$

1. Zeigen Sie, dass die gesamte Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons zu jedem Zeitpunkt auf Eins normiert ist.
2. Berechnen Sie den wahrscheinlichsten Ort des Elektrons.

Aufgabe 2.2.2

Das eindimensionale Wellenpaket

$$\psi(z, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \widehat{\psi}(k) e^{i(kz - \omega(k)t)}; \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

habe zur Zeit $t = 0$ die Gestalt einer Gauß-Glocke:

$$\psi(z, 0) = A e^{-\frac{z^2}{2b^2}} e^{ik_0 z}.$$

1. Bestimmen Sie die (reelle) Normierungskonstante A .
2. Zeigen Sie, dass die Gewichtsfunktion (Fourier-Transformierte) $\widehat{\psi}(k)$ der Wellenfunktion $\psi(z, t)$ ebenfalls die Gestalt einer Gauß-Glocke hat.
3. Als *Breite* der Gauß-Glocke definieren wir den Abstand der symmetrisch zum Maximum liegenden Punkte, bei denen der Funktionswert auf den e -ten Teil des Maximums abgefallen ist. Berechnen Sie die Breite Δk von $|\widehat{\psi}(k)|^2$.
4. Bestimmen Sie die volle Orts- und Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion $\psi(z, t)$.
5. Verifizieren Sie für die Wahrscheinlichkeitsdichte den folgenden Ausdruck:

$$\rho(z, t) = |\psi(z, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta b(t)} \exp \left\{ -\frac{\left(z - \frac{\hbar k_0}{m} t \right)^2}{(\Delta b(t))^2} \right\}.$$

Dabei gilt:

$$\Delta b(t) = \frac{1}{b} \sqrt{b^4 + \left(\frac{\hbar}{m} t \right)^2}.$$

Aufgabe 2.2.3

Ein Teilchen der Masse m mit dem Impuls p werde durch das Gauß'sche Wellenpaket aus Aufgabe 2.2.2 beschrieben.

1. Nach welcher Flugzeit hat sich die Breite des Pakets verdoppelt?
2. Nach welcher Flugstrecke hat sich die Breite des Pakets verdoppelt?
3. Ein freies Proton habe die kinetische Energie $T = 1 \text{ MeV}$. Nach welcher Flugstrecke hat das Proton seine anfängliche Linearausdehnung $b = 10^{-2} \text{ \AA}$ verdoppelt?

Aufgabe 2.2.4

Die Wellenfunktion eines Elektrons entspreche dem Gauß'schen Wellenpaket.

1. Wie breit ist das Paket nach 1 Sekunde, wenn es zur Zeit $t = 0$ die Breite $2b = 1 \text{ \AA}$ besaß?
2. Das Elektron aus Teil 1) habe eine Potentialdifferenz von 100 V durchfallen. Welche Breite hat es nach einer Flugstrecke von 10 cm?
3. Wie ändern sich die Resultate von 1) und 2), wenn das Wellenpaket eine Anfangsbreite von $2b = 10^{-3} \text{ cm}$ besitzt?

Aufgabe 2.2.5

Ein Teilchen der Masse m werde durch die folgende Wellenfunktion beschrieben:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A \cdot r \exp\left(-\frac{r}{2a} + i\frac{\hbar}{8ma^2} \cdot t + i\varphi\right) \sin \vartheta$$

1. Berechnen Sie die reelle Normierungskonstante A !
2. Bestimmen Sie die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$!
3. Geben Sie den Energieeigenwert E an!
4. Berechnen Sie die potentielle Energie $V(\mathbf{r})$ des Teilchens! Identifizieren Sie die Konstante a mit dem Bohr'schen Radius:

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}.$$

Aufgabe 2.2.6

Ein Teilchen besitze zu einem bestimmten Zeitpunkt die Wellenfunktion

$$\psi(x) = \begin{cases} A x e^{-\alpha x} & \text{für } x \geq 0 \\ 0 & \text{für } x < 0 \end{cases}$$

A reell, $\alpha > 0$. Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit, dass bei einer Messung des Impulses zum betreffenden Zeitpunkt ein Wert zwischen $-\hbar\alpha$ und $+\hbar\alpha$ gefunden wird.

Aufgabe 2.2.7

1. Als Mittelwert (Erwartungswert) des Teilchenorts z definiert man die Größe:

$$\langle z \rangle_t = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dz |\psi(z, t)|^2 z}{\int_{-\infty}^{+\infty} dz |\psi(z, t)|^2} .$$

Interpretieren Sie diesen Ausdruck.

2. Berechnen Sie $\langle z \rangle_t$ für das eindimensionale Gauß'sche Wellenpaket.
 3. Berechnen Sie die mittlere quadratische Schwankung

$$\Delta z = \sqrt{\langle (z - \langle z \rangle)^2 \rangle}$$

für das Gauß'sche Wellenpaket.

4. Berechnen und interpretieren Sie die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $j(z, 0)$ des eindimensionalen Gauß'schen Wellenpakets.

Aufgabe 2.2.8

Ein Teilchen befolge im Ortsraum die Schrödinger-Gleichung

$$\left(i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \psi(\mathbf{r}, t) = 0$$

mit

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) .$$

Wie lautet die Schrödinger-Gleichung im Impulsraum, wenn $V(\mathbf{r})$ eine Fourier-Transformierte $V(\mathbf{p})$ besitzt:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \int d^3 p \, e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{p}) ?$$

Aufgabe 2.2.9

Auf einem Quader mit den Kantenlängen L_x, L_y, L_z seien periodische Randbedingungen definiert. Verifizieren Sie die Darstellung (2.80) des Kronecker-Deltas:

$$\delta_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} = \frac{1}{V} \int_V d^3 r \, e^{-\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r}} ; \quad V = L_x L_y L_z .$$

Aufgabe 2.2.10

1. Infolge periodischer Randbedingungen für die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ eines Teilchens auf einem Quader mit den Kantenlängen L_x, L_y, L_z werden die Impulse des Teilchens wie in (2.76) angegeben diskretisiert. Insbesondere muss dann die Delta-Funktion $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$ durch das Kronecker-Delta $\delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ ersetzt werden. Zeigen Sie, dass der formale Zusammenhang

$$\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \rightarrow \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$$

besteht!

2. Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ lässt sich durch die Fourier-Summe

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}}(t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right)$$

ausdrücken. Wie lautet die „Umkehrung“ und welche physikalische Bedeutung besitzt $c_{\mathbf{p}}(t)$?

Aufgabe 2.2.11

Betrachten Sie ein System aus zwei (spinlosen) Teilchen der Massen m_1 und m_2 , die über das reelle Potential $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ miteinander wechselwirken. Das System werde beschrieben durch die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$. Wie lautet in diesem Fall die Kontinuitätsgleichung?

Aufgabe 2.2.12

Gehen Sie davon aus, dass die klassische Beziehung zwischen Ort und Impuls in der Quantenmechanik für die entsprechenden Erwartungswerte gültig ist (Ehrenfest-Theorem):

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = m \frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \rangle_t .$$

Zeigen Sie mithilfe der Schrödinger-Gleichung und der Quadratintegrabilität der Wellenfunktion, dass dann

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = \int d^3r \, \psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla_r \psi(\mathbf{r}, t)$$

gelten muss.

Aufgabe 2.2.13

Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ eines Teilchens sei reellwertig. Zeigen Sie, dass dann der Erwartungswert des Impulses Null ist.

Aufgabe 2.2.14

Die impulsabhängige Wellenfunktion $\psi(\mathbf{p}, t)$ sei reellwertig. Zeigen Sie, dass dann der Erwartungswert des Ortes \mathbf{r} null ist!

Aufgabe 2.2.15

Man zeige, dass der Erwartungswert

$$\langle \mathbf{r} \rangle_t = \int d^3p \, \bar{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \left(-\frac{\hbar}{i} \nabla_p \right) \bar{\psi}(\mathbf{p}, t)$$

reell ist. Die Wellenfunktion $\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)$ sei quadratintegrierbar.

2.3 Der Impulsoperator

2.3.1 Impuls- und Ortsdarstellung

Wir kommen noch einmal zu dem Erwartungswert des Impulses (2.85) zurück, versuchen nun aber $\langle \mathbf{p} \rangle_t$ im Ortsraum, d. h. mithilfe von $\psi(\mathbf{r}, t)$ zu berechnen. So ohne Weiteres ist das nicht möglich, da wir nicht wissen, wie wir \mathbf{p} durch \mathbf{r} auszudrücken haben. Ansonsten könnten wir direkt (2.83) verwenden. Wir können allerdings in einem ersten Schritt in (2.85) $\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)$ mithilfe der Fourier-Transformation (2.72) durch $\psi(\mathbf{r}, t)$ ersetzen:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle_t &= \int d^3p \, \bar{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} \bar{\psi}(\mathbf{p}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \iint d^3r d^3r' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) \psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{p} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'\right) \psi(\mathbf{r}', t) \end{aligned} \quad (2.87)$$

Das lässt sich auch wie folgt schreiben:

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \iint d^3r d^3r' \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) \psi^*(\mathbf{r}, t) \left(i\hbar \nabla_{\mathbf{r}'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}'\right) \right) \psi(\mathbf{r}', t).$$

Mit der speziellen Form der δ -Funktion,

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\right),$$

ergibt sich

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = \iint d^3r d^3r' \psi^*(\mathbf{r}, t) (i\hbar \nabla_{r'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) \psi(\mathbf{r}', t).$$

Die \mathbf{r}' -Integration lässt sich ausführen (Gl. (1.16) in Bd. 3):

$$\int d^3r' (\nabla_{r'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) \psi(\mathbf{r}', t) = -\nabla_r \psi(\mathbf{r}, t).$$

Damit erhalten wir für den Impulserwartungswert im Ortsraum das folgende bemerkenswerte Resultat:

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \left(\frac{\hbar}{i} \nabla_r \right) \psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.88)$$

Formal ist dieser Ausdruck mit dem Erwartungswert (2.83) identisch, allerdings nur dann, wenn wir der dynamischen Variablen *Impuls* im Ortsraum einen Operator zuordnen:

Impuls in Ortsdarstellung

$$\hat{\mathbf{p}} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla_r. \quad (2.89)$$

Wir sind damit auf ein ganz wesentliches Charakteristikum der Quantenmechanik gestoßen, die den Observablen, d. h. den beobachtbaren, messbaren Größen Operatoren zuordnet. Dazu wird in den nächsten Kapiteln noch viel zu sagen sein. – Wir wollen bis auf Weiteres Operatoren zur Unterscheidung von normalen Variablen mit einem „ \wedge “ kennzeichnen. Später, wenn keine Verwechslungen mehr zu befürchten sind, werden wir davon wieder Abstand nehmen. – Im Ortsraum ist der Ortsoperator $\hat{\mathbf{r}}$ als Spezialfall mit dem Vektor \mathbf{r} identisch, verhält sich im Integranden von (2.82) deshalb rein multiplikativ, wohingegen in (2.88) die Reihenfolge der Terme natürlich strikt eingehalten werden muss. Der Gradient wirkt nach rechts auf die \mathbf{r} -abhängige Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$.

Wir können das Ergebnis (2.89) auf die allgemeinere Teilcheneigenschaft $B(\mathbf{p})$ übertragen, von der wir annehmen, dass wir sie als Polynom oder als absolut konvergente Reihe in p_x, p_y, p_z schreiben können:

$$\langle \widehat{B}(\mathbf{p}) \rangle_t = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) B\left(\frac{\hbar}{i} \nabla_r\right) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.90)$$

$$\widehat{B}(\mathbf{p}) \longrightarrow B\left(\frac{\hbar}{i} \nabla_r\right). \quad (2.91)$$

2.3 Der Impulsoperator

Schaut man sich nun die Mittelwerte (2.82), (2.83), (2.88) und (2.90) an, so erkennt man die stets gleiche Struktur: Der zu mittelnden physikalischen Größe wird ein Operator \hat{X} mit ganz bestimmten, noch im einzelnen zu besprechenden Eigenschaften zugeordnet. Der Mittelwert ist dann durch den Ausdruck

$$\langle \hat{X} \rangle_t = \int d^3 r \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{X} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.92)$$

gegeben mit der Korrespondenzvorschrift

$$\hat{X} = \begin{cases} X(\hat{\mathbf{r}}) & \longrightarrow X(\mathbf{r}), \\ X(\hat{\mathbf{p}}) & \longrightarrow X\left(\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}}\right). \end{cases} \quad (2.93)$$

Man spricht in diesem Fall von der

- Ortsdarstellung des Operators \hat{X} .

Nun sind wir zu diesen Resultaten gekommen, indem wir zunächst versuchten, den Impulserwartungswert $\langle \mathbf{p} \rangle_t$ im Ortsraum darzustellen. Wir hätten natürlich genauso gut uns das Ziel setzen können, den Erwartungswert des Ortes $\langle \mathbf{r} \rangle$ im Impulsraum zu formulieren, d. h. durch $\bar{\psi}(\mathbf{p}, t)$ auszudrücken. Mit exakt derselben Argumentationskette wären wir dann zu der Schlussfolgerung gekommen, dass jeder zu mittelnden physikalischen Größe ein Operator \hat{Y} zuzuordnen ist mit der Korrespondenzvorschrift

$$\hat{Y} = \begin{cases} Y(\hat{\mathbf{r}}) & \longrightarrow Y\left(-\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}}\right), \\ Y(\hat{\mathbf{p}}) & \longrightarrow Y(\mathbf{p}). \end{cases} \quad (2.94)$$

Das nennen wir die

- Impulsdarstellung des Operators \hat{Y} .

Der Mittelwert ist nun durch den Ausdruck

$$\langle \hat{Y} \rangle_t = \int d^3 p \bar{\psi}^*(\mathbf{p}, t) \hat{Y} \bar{\psi}(\mathbf{p}, t) \quad (2.95)$$

gegeben. Insbesondere gilt für den

Ort in Impulsdarstellung:

$$\hat{\mathbf{r}} \longrightarrow -\frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}}. \quad (2.96)$$

∇_p ist der Gradient im Impulsraum:

$$\nabla_p \equiv \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right). \quad (2.97)$$

Wir erkennen erneut die völlige Äquivalenz von Orts- und Impulsdarstellung. Die Gleichwertigkeit der Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r}, t)$ und $\psi(\mathbf{p}, t)$ hatten wir uns bereits früher verdeutlicht. Die strenge Symmetrie der beiden Darstellungen für die Operatoren wird durch (2.93) und (2.94) dokumentiert. Die Mittelwerte (2.92) und (2.95) werden in den beiden Darstellungen in formal identischer Weise gebildet. Die Ursache für diese Symmetrien und Äquivalenzen ist in der Tatsache zu suchen, dass die quantenmechanischen Konzepte unabhängig von jeder speziellen Darstellung allgemein und abstrakt formuliert werden können. Orts- und Impulsdarstellung sind zwei gleichberechtigte, konkrete Realisierungen dieser allgemeinen Konzepte, auf die wir in Kap. 3 ausführlich eingehen werden.

Die Vorschriften (2.93) und (2.94) lassen sich zusammengefasst auf solche Teilcheneigenschaften übertragen, die sowohl vom Ort als auch vom Impuls abhängen:

$$\widehat{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \longrightarrow \begin{cases} F\left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla_r\right): & \text{Ortsdarstellung,} \\ F\left(-\frac{\hbar}{i}\nabla_p, \mathbf{p}\right): & \text{Impulsdarstellung.} \end{cases} \quad (2.98)$$

Für den Mittelwert der Größe \widehat{F} ergeben sich damit zwei äquivalente Formulierungen:

$$\begin{aligned} \langle \widehat{F} \rangle_t &= \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) F\left(\mathbf{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla_r\right) \psi(\mathbf{r}, t) = \\ &= \int d^3p \bar{\psi}^*(\mathbf{p}, t) F\left(-\frac{\hbar}{i}\nabla_p, \mathbf{p}\right) \bar{\psi}(\mathbf{p}, t). \end{aligned} \quad (2.99)$$

2.3.2 Nicht-Vertauschbarkeit von Operatoren

Eine spezielle Eigentümlichkeit der Quantenmechanik sorgt nun allerdings auch dafür, dass die Vorschrift (2.98) so noch nicht eindeutig ist. Diese Eigentümlichkeit besteht in der Nicht-Vertauschbarkeit gewisser Operatoren. Der sogenannte

Definition 2.3.1

$$\text{Kommutator: } \quad [\widehat{A}, \widehat{B}]_- = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}, \quad (2.100)$$

2.3 Der Impulsoperator

gebildet aus den Operatoren \widehat{A} und \widehat{B} , kann von Null verschieden und selbst wieder ein Operator sein.

Die Reihenfolge der Operatoren ist im Allgemeinen nicht beliebig!

Das wollen wir an einem wichtigen Beispiel demonstrieren. Da der Kommutator aus Operatoren aufgebaut ist, müssen wir ihn zu seiner Berechnung auf eine Wellenfunktion wirken lassen. $\psi(\mathbf{r}, t)$ sei eine beliebig vorgegebene Wellenfunktion:

$$[\widehat{z}, \widehat{p}_z]_- \psi(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} z \right) \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar}{i} \psi(\mathbf{r}, t).$$

Da das für alle ψ gilt, können wir an dieser Gleichung die folgende Operatoridentität ableiten:

$$[\widehat{z}, \widehat{p}_z]_- = -\frac{\hbar}{i} = i\hbar. \quad (2.101)$$

Entsprechende Beziehungen lassen sich auch für die anderen Komponenten ableiten. Insgesamt findet man:

$$[\widehat{p}_{x_i}, \widehat{x}_j]_- = \frac{\hbar}{i} \delta_{ij}, \quad (2.102)$$

$$[\widehat{p}_{x_i}, \widehat{p}_{x_j}]_- = [\widehat{x}_i, \widehat{x}_j]_- = 0 \quad (2.103)$$

$$i, j = 1, 2, 3; \quad x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z.$$

Später werden wir sehen, dass die Nicht-Vertauschbarkeit von Operatoren etwas damit zu tun hat, dass die zugehörigen Observablen nicht gleichzeitig scharf messbar sind. Wir werden in Kap. 3 zeigen, dass (2.102) in direktem Bezug zur Heisenberg'schen Unbestimmtheitsrelation (1.5) steht.

Die Nicht-Vertauschbarkeit von Orts- und Impulsoperator macht die Korrespondenzvorschrift (2.98) mehrdeutig. Algebraisch äquivalente Formen der Observablen $F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ können nach (2.98) durchaus zu unterschiedlichen Operatoren führen. Die beiden eindimensionalen Beispiele

$$p_z^2 \longleftrightarrow \frac{1}{z^2} p_z^2 z^2$$

sind algebraisch natürlich äquivalent, entsprechen aber nach der Übersetzungsvorschrift (2.98) verschiedenen Operatoren. So findet man in der Ortsdarstellung:

$$p_z^2 \longrightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

$$\frac{1}{z^2} p_z^2 z^2 \longrightarrow -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{4}{z} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{2}{z^2} \right).$$

Solche Mehrdeutigkeiten sind natürlich unvermeidbar, wenn man die Quantenmechanik auf einer Korrespondenz zur Klassischen Mechanik aufbaut, da für letztere sämtliche Variablen kommutativ sind. Man muss (2.98) durch empirische Zusatzvorschriften ergänzen. Dies wird an einem wichtigen Beispiel im nächsten Abschnitt demonstriert.

2.3.3 Korrespondenzregel

Wir haben in diesem Kap. 2 bereits eine Reihe entscheidender Resultate gefunden, die uns schon jetzt im Prinzip in die Lage versetzen, mit der quantitativen Diskussion typisch quantenmechanischer Phänomene zu beginnen. Zentrale Aufgabenstellung wird vorläufig die Lösung der Schrödinger-Gleichung sein. Es empfiehlt sich deshalb, ein eindeutiges und übersichtliches Rezept zum Aufstellen der Schrödinger-Gleichung zu entwerfen. Folgende Schritte bieten sich nach unseren Vorüberlegungen an:

1. Wir formulieren das zu lösende physikalische Problem zunächst in der uns vertrauten klassischen Hamilton-Mechanik, d. h., wir konstruieren die zugehörige klassische Hamilton-Funktion:

$$H = H(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s, t) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t).$$

Die q_j sind generalisierte Koordinaten, die p_j dazu kanonisch konjugierte Impulse; s ist die Zahl der Freiheitsgrade. Für ein konservatives System ist H mit der Gesamtenergie E identisch:

$$H(q_1, \dots, p_s, t) = E. \quad (2.104)$$

2. Wir ordnen dem klassischen System ein Quantensystem zu, dessen Zustand durch eine Wellenfunktion $\psi(q_1, \dots, q_s, t)$ beschrieben wird. Diese ist im durch die q_j aufgespannten *Konfigurationsraum* (s. Abschn. 2.4.1, Bd. 2) definiert.
3. Messbaren physikalischen Systemeigenschaften (*Observable*) werden ganz besondere Operatoren zugeschrieben mit bestimmten, noch zu besprechenden Eigenschaften. Klassische Observable sind Funktionen des Phasenraums, also (\mathbf{q}, \mathbf{p}) -abhängig. Sie werden durch die Korrespondenzvorschrift (2.98) zu Operatoren:

$$A(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \longrightarrow \hat{A}\left(q_1, \dots, q_s, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_s}, t\right). \quad (2.105)$$

Das gilt insbesondere für die Hamilton-Funktion, die auf diese Weise zum Hamilton-Operator \hat{H} wird:

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \longrightarrow \hat{H}\left(q_1, \dots, q_s, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_s}, t\right). \quad (2.106)$$

2.3 Der Impulsoperator

Diese Operatoren wirken als spezielle Differentialoperatoren auf die Wellenfunktionen in 2).

4. Die Energiebeziehung (2.104) wird mit der Wellenfunktion ψ multipliziert und anschließend der Übergang (2.106) vollzogen. Das Resultat ist die

zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\begin{aligned} \hat{H} \left(q_1, \dots, q_s, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_s}, t \right) \psi(q_1, \dots, q_s, t) = \\ = E \psi(q_1, \dots, q_s, t), \end{aligned} \quad (2.107)$$

die wir bereits aus (2.15) kennen, hier aber auf völlig andere Weise *abgeleitet* haben.

5. Die besondere Rolle von Energie und Zeit als konjugierte Variable wird uns noch beschäftigen. Durch die weitere Transformationsvorschrift (2.17),

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (2.108)$$

wird aus (2.107) die **zeitabhängige Schrödinger-Gleichung**.

Damit ist das Problem dann vollständig formuliert. Die weitere Aufgabe wird in der Suche nach mathematischen Lösungsverfahren für die Schrödinger-Gleichung bestehen.

Wir wollen dieses Konzept noch in zwei wichtigen Punkten kommentieren, um Fehlerquellen und Missverständnissen vorzubeugen:

A) In der klassischen Hamilton-Mechanik (s. Kap. 2, Bd. 2) ist die Wahl der generalisierten Koordinaten q_1, \dots, q_s willkürlich, nur ihre Gesamtzahl s steht fest. So sind zum Beispiel für ein einzelnes Teilchen die Hamilton-Funktionen in kartesischen Koordinaten,

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z), \quad (2.109)$$

und in Kugelkoordinaten (1.104),

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\vartheta^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} p_\varphi^2 \right) + V(r, \vartheta, \varphi), \quad (2.110)$$

formal völlig verschieden, führen aber zu denselben physikalischen Resultaten. Man kann sich also nach Zweckmäßigkeitsgesichtspunkten für die eine oder die andere Version entscheiden.

Die Freiheit in der Wahl der generalisierten Koordinaten q_1, \dots, q_s führt nun allerdings mit der Korrespondenzvorschrift (2.106) zu Mehrdeutigkeiten für die quantenmechanischen

Hamilton-Operatoren. Mit (2.109) folgt:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) . \quad (2.111)$$

Aus (2.110) ergibt sich dagegen mit der Vorschrift (2.106):

$$\overline{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V(r, \vartheta, \varphi) .$$

Dieser Ausdruck ist jedoch **nicht** mit (2.111) äquivalent, wie man erkennt, wenn man dort den Laplace-Operator Δ in Kugelkoordinaten einsetzt ((2.145), Bd. 3):

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\vartheta, \varphi} , \\ \Delta_{\vartheta, \varphi} &= \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} . \end{aligned} \quad (2.112)$$

Diese offensichtliche Diskrepanz hebeln wir durch die Zusatzvorschrift aus, die Korrespondenz (2.106) nur bei kartesischen Koordinaten zuzulassen. \hat{H} in (2.111) ist also korrekt, \overline{H} dagegen nicht. Anschließend kann man natürlich, wenn es zweckmäßig erscheint, den Laplace-Operator auf irgendein günstiges Koordinatensystem transformieren, also zum Beispiel (2.112) in (2.111) verwenden. Diese Vorschrift erscheint recht willkürlich, hat sich aber als widerspruchsfrei erwiesen. Sie lässt sich im Übrigen tiefer begründen, was jedoch den Rahmen dieses **Grundkurs: Theoretische Physik** übersteigt.

B) Es gibt eine weitere Quelle für Mehrdeutigkeiten in der Korrespondenzvorschrift (2.106), die auf der bereits im letzten Abschnitt diskutierten Nicht-Vertauschbarkeit von Impuls- und Ortsoperator beruht. In den meisten Fällen besteht die in kartesischen Koordinaten formulierte Hamilton-Funktion aus einem Term, der nur von den Impulsquadraten abhängt, und einem Term, der nur von den Ortskoordinaten abhängt. Für solche Terme ergeben sich natürlich keine Schwierigkeiten. Hinzukommen können jedoch in manchen Fällen noch Ausdrücke der Form

$$p_i f_j(q_1, \dots, q_s) ,$$

in die die Impulse linear eingehen. Für die Korrespondenzregel (2.106) wären $p_i f_j$ und $f_j p_i$ nicht äquivalent. Man vereinbart deshalb, solche Terme vor Anwendung der Korrespondenzregel zu symmetrisieren:

$$p_i f_j(\mathbf{q}) \longrightarrow \frac{1}{2} (p_i f_j(\mathbf{q}) + f_j(\mathbf{q}) p_i) . \quad (2.113)$$

Ein prominentes Anwendungsbeispiel ist das geladene Teilchen im elektromagnetischen Feld (Ladung \tilde{q} ; Vektorpotential $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$; skalares Potential $\varphi(\mathbf{r}, t)$). Dieses besitzt die

2.3 Der Impulsoperator

Hamilton-Funktion ((2.39), Bd. 2):

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - \tilde{q}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2 + \tilde{q}\varphi(\mathbf{r}, t) . \quad (2.114)$$

Beim Ausmultiplizieren der Klammer fällt der gemischte Term unter die Regel (2.113). Es ergibt sich dann nach der Korrespondenzregel der folgende Hamilton-Operator:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \Delta - \tilde{q} \frac{\hbar}{i} (\operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + 2\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_r) + \tilde{q}^2 A^2(\mathbf{r}, t) \right] + \tilde{q}\varphi(\mathbf{r}, t) . \quad (2.115)$$

2.3.4 Aufgaben

Aufgabe 2.3.1

Zeigen Sie, dass der Erwartungswert

$$\langle \mathbf{p} \rangle_t = \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}, t) \frac{\hbar}{i} \nabla_r \psi(\mathbf{r}, t)$$

reell ist. Die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ soll quadratintegrierbar sein.

Aufgabe 2.3.2

Gegeben sei die Grundzustandswellenfunktion des Elektrons im Wasserstoffatom:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} \exp\left(-\frac{|\mathbf{r}|}{a_B}\right); \quad a_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} .$$

Berechnen Sie:

1. $\int d^3r |\psi(\mathbf{r})|^2$,
2. $\langle \mathbf{r} \rangle$; $\langle \mathbf{r}^2 \rangle$; $\Delta r = \sqrt{(\langle \mathbf{r}^2 \rangle - \langle \mathbf{r} \rangle^2)}$,
3. $\langle \mathbf{p} \rangle$; $\langle \mathbf{p}^2 \rangle$; $\Delta p = \sqrt{(\langle \mathbf{p}^2 \rangle - \langle \mathbf{p} \rangle^2)}$,
4. $\Delta r \Delta p$,
5. Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$.

Aufgabe 2.3.3

Gegeben sei die Wellenfunktion des sich in einem angeregten Zustand befindlichen Elektrons im Wasserstoffatom:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\sqrt{4\pi a_{\text{B}}^3}} \frac{r}{a_{\text{B}}} \exp\left(-\frac{r}{2a_{\text{B}}}\right) \sin \vartheta \exp(i\varphi) .$$

Berechnen Sie die Stromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{r})$.

Aufgabe 2.3.4

Berechnen Sie die folgenden Kommutatoren:

1. $[p, x^n]_- \ (n \geq 1) ,$
2. $[x^{-1}, p]_- ,$
3. $[p^n, x]_- \ (n \geq 1) .$

Aufgabe 2.3.5

Berechnen Sie die Kommutatoren

1. $[x^{-1}, xp]_-$
2. $[L_x, L_y]_- ; \ \mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z) \text{ „Drehimpuls“}$
3. $[\mathbf{L}^2, L_z]_-$

Aufgabe 2.3.6

1. $F(x)$ sei eine Funktion der x -Komponente des Ortsoperators. Zeigen Sie, dass

$$[p_x, F(x)]_- = \frac{\hbar}{i} \frac{dF(x)}{dx}$$

gilt.

2. $G(p_x)$ sei eine Funktion der x -Komponente des Impulsoperators. Verifizieren Sie:

$$[G(p_x), x] = \frac{\hbar}{i} \frac{dG(p_x)}{dp_x} .$$

Aufgabe 2.3.7

1. Der Translationsoperator $T(\mathbf{a})$ ist definiert durch

$$T(\mathbf{a})\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}),$$

wobei $\psi(\mathbf{r})$ eine beliebige Wellenfunktion sein kann. Drücken Sie $T(\mathbf{a})$ durch den Impulsoperator \mathbf{p} aus.

2. Beweisen Sie:

$$T(\mathbf{a})\mathbf{r}T^{-1}(\mathbf{a}) = \mathbf{r} + \mathbf{a}.$$

Aufgabe 2.3.8

Die Wellenfunktion eines Teilchens der Masse m sei durch

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(\pi b^2)^{3/4}} \exp\left(-\frac{r^2}{2b^2} - i\frac{\hbar}{2mb^2}t\right)$$

gegeben. Dabei sind $b = \sqrt{\hbar/m\omega}$ eine Konstante mit der Dimension *Länge* und ω eine feste Frequenz. Bestimmen Sie die potentielle Energie $V(\mathbf{r})$ des Teilchens.

Aufgabe 2.3.9

Stellen Sie die zeitunabhängige, eindimensionale Schrödinger-Gleichung im Potential

$$V(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \bar{V}(p) e^{\frac{i}{\hbar}pq}$$

in der Impulsdarstellung auf, d. h. für die Wellenfunktion $\bar{\psi}(p)$:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \psi(q) e^{-\frac{i}{\hbar}pq}.$$

Aufgabe 2.3.10

Zeigen Sie, dass für ein freies Teilchen die Erwartungswerte von Ort und Impuls die „klassische“ Relation

$$\langle \dot{\mathbf{r}} \rangle = \frac{1}{m} \langle \mathbf{p} \rangle$$

erfüllen. Benutzen Sie bereits an dieser Stelle, dass der Hamilton-Operator des freien Teilchens

$$H_0 = \frac{p^2}{2m}$$

ein „hermitescher Operator“ ist, für den gilt:

$$\int dx \varphi^*(x) (H\psi(x)) = \int dx (H\varphi(x))^* \psi(x) .$$

Kontrollfragen

Zu Abschn. 2.1

1. Wann, von wem und in welchem Zusammenhang wurde erstmals die Idee formuliert, der Materie auch Welleneigenschaften zuzuordnen?
2. In welcher speziellen Weise bedient sich die Hamilton-Jacobi-Theorie der Methode der kanonischen Transformation?
3. Was versteht man unter *Wirkungswellen*?
4. Welche Beziehungen bezüglich Betrag und Richtung bestehen zwischen Teilchengeschwindigkeit v und Wellengeschwindigkeit u ?
5. Formulieren Sie die Wellengleichung der Klassischen Mechanik.
6. Unter welchen Bedingungen ist die geometrische Optik gültig?
7. Wie lautet die *Eikonalgleichung* der geometrischen Optik?
8. Durch welche einfachen Beziehungen legen Impuls und Energie des Teilchens Frequenz und Wellenlänge der betreffenden Wirkungswelle fest?
9. Interpretieren Sie die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung.
10. Was versteht man unter dem Hamilton-Operator eines Teilchens?
11. Welcher Operator ist beim Übergang von der zeitunabhängigen zur zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung der Energievariablen E zuzuordnen?
12. Wie kann man mithilfe der Wellenvorstellung der Materie die Bohr'schen Postulate begründen?
13. Wie lässt sich die Wellenlänge einer Elektronenwelle experimentell bestimmen?
14. Wie groß muss die kinetische Energie eines Neutrons sein, damit seine Wellenlänge in die Größenordnung üblicher Gitterkonstanten kommt?
15. Auf welchem Prinzip arbeitet das Elektronenmikroskop?
16. Warum ist Neutronenbeugung besonders hilfreich bei der Untersuchung magnetischer Festkörper?
17. Erläutern Sie die wichtigsten Unterschiede zwischen elektromagnetischen Wellen und Materiewellen.

18. Lässt sich die Phasengeschwindigkeit einer Materiewelle messen?
19. Diskutieren Sie die Elektronenbeugung am Doppelspalt. Wie ändert sich die Intensitätsverteilung, wenn man die beiden Spalten nacheinander öffnet?
20. Lässt sich beim Doppelspaltexperiment der Auftreffort eines einzelnen Elektrons auf dem Detektor vorhersagen? Welche Aussagen sind tatsächlich möglich?
21. Welche Gründe sprechen gegen eine direkte Identifikation des Elektrons als Welle?

Zu Abschn. 2.2

1. Welche physikalische Bedeutung muss den Materiewellen zugesprochen werden?
2. Interpretieren Sie die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ und ihr Betragsquadrat $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$.
3. Lässt sich die Schrödinger-Gleichung beweisen?
4. Ist die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ direkt messbar?
5. Welche mathematischen Funktionen kommen als Wellenfunktionen überhaupt nur in Betracht?
6. Wie ist die Wahrscheinlichkeitsstromdichte definiert?
7. Wie lautet die Kontinuitätsgleichung der Wahrscheinlichkeit? Worin besteht ihre physikalische Aussage?
8. Von welchem mathematischen Typ ist die Schrödinger-Gleichung?
9. Was ist eine ebene Welle? Warum bezeichnet man sie als *eben*?
10. Wie unterscheiden sich bei der ebenen Welle Phasen- und Gruppengeschwindigkeit?
11. Welche Aussagen lassen sich über Ort und Impuls eines Teilchens machen, wenn diesem eine ebene Welle als Wellenfunktion zugeordnet ist?
12. Was versteht man unter einem Wellenpaket?
13. Mit welcher Geschwindigkeit kann in einem Wellenpaket Information transportiert werden?
14. Warum darf die Phasengeschwindigkeit u auch größer als die Lichtgeschwindigkeit sein?
15. Erläutern Sie anhand des einfachen, eindimensionalen Wellenpakets (2.55), warum Impuls und Ort eines durch diese Wellenfunktion beschriebenen Teilchens nicht gleichzeitig beliebig genau bekannt sein können.
16. Wird durch die ebene Welle die Unbestimmtheitsrelation verletzt?
17. Erklären Sie qualitativ das Breitfließen von Wellenpaketen.
18. Wann spricht man im Zusammenhang mit Wellenpaketen von *Dispersion*?
19. Wird das Breitfließen auch bei Paketen aus elektromagnetischen Wellen beobachtet?
20. Welcher Zusammenhang besteht zwischen dem Breitfließen und der Heisenberg'schen Unbestimmtheitsrelation?
21. Wie hängen die Wellenfunktionen im Orts- und im Impulsraum, $\psi(\mathbf{r}, t)$ und $\widehat{\psi}(\mathbf{p}, t)$, zusammen?
22. Welche Bedeutung wird $|\widehat{\psi}(\mathbf{p}, t)|^2$ zugeschrieben?
23. Was versteht man unter periodischen Randbedingungen?
24. Welche Aussagen über Ort und Impuls sind wirklich messbar?

25. Formulieren Sie den Mittelwert $\langle A(\mathbf{r}) \rangle$ mithilfe der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ bzw. $\hat{\psi}(\mathbf{p}, t)$.
26. Wie ist die mittlere quadratische Schwankung definiert? Was sagt sie aus?

Zu Abschn. 2.3

1. Welche Operatorgestalt nimmt die dynamische Variable *Impuls* in der Ortsdarstellung an?
2. Wie lautet die Impulsdarstellung des Teilchenorts \mathbf{r} ?
3. Was ist die Ursache für die formale Äquivalenz von Impuls- und Ortsdarstellung?
4. Nach welcher Vorschrift wird der Erwartungswert $\langle F \rangle_t$ der Observablen $F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ im Orts- bzw. Impulsraum gebildet?
5. Wie ist der Kommutator zweier Operatoren definiert?
6. Welchen Wert hat der Kommutator $[z, p_z]_-$?
7. Nach welcher Korrespondenzvorschrift erhält man aus einer klassischen Variablen $A(q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s)$ den zugehörigen quantenmechanischen Operator?
8. Welcher Operator ist der Energievariablen E zugeordnet?
9. Ist die unter Frage 7) erwähnte Korrespondenzvorschrift eindeutig bei einem Koordinatenwechsel?
10. Erläutern Sie die Mehrdeutigkeiten, die aus der Nicht-Vertauschbarkeit von Orts- und Impulsoperatoren resultieren. Wie behebt man sie?
11. Wie lautet der Hamilton-Operator eines geladenen Teilchens im elektromagnetischen Feld?

Grundkurs Theoretische Physik 5/1

Quantenmechanik - Grundlagen

Nolting, W.

2013, XVIII, 539 S. 124 Abb. in Farbe., Softcover

ISBN: 978-3-642-25402-4