

$\Delta\varphi = n \cdot \pi$, für n ungerade. Komplette Auslöschung sowie maximale Verstärkung sind nur für $E_{10} = E_{20}$ möglich.

2.4 Doppelspaltexperiment mit Mikroteilchen

Wiederholt man nun schließlich das Doppelspaltexperiment mit Mikroteilchen, wie Elektronen oder Photonen, so erhält man ein analoges Ergebnis wie für Wellen, d.h. man beobachtet Interferenz. Der Unterschied ist nur, dass in diesem Fall keine kontinuierliche Quelle der Welle vorliegt⁴, sondern diskrete Energieportionen ausgesandt werden. Daher sind die Einzelereignisse zufällig, wie im Fall klassischer Teilchen. Diese Situation ist im linken Teil von Abbildung 2.6 skizziert. Auf dem Schirm ist das Interferenzbild dargestellt, das sich nach Mittelung über viele wiederholte Einzelereignisse ergibt. Der direkte Nachweis, dass die Interferenz nicht aus der Überlagerung vieler Teilchen entsteht, sondern bereits bei einem einzigen Elektron im Apparat auftritt, ist äußerst schwierig und gelang erst 1989 Tonomura und Mitarbeitern [Tonomura et al., 1989].

Das heißt, für die mathematische Beschreibung gehen wir wieder vor wie bei elektromagnetischen Wellen, verwenden aber statt der Intensität $I(x)$ als Messgröße die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x)$, wie im rechten Teil der Abbildung skizziert.

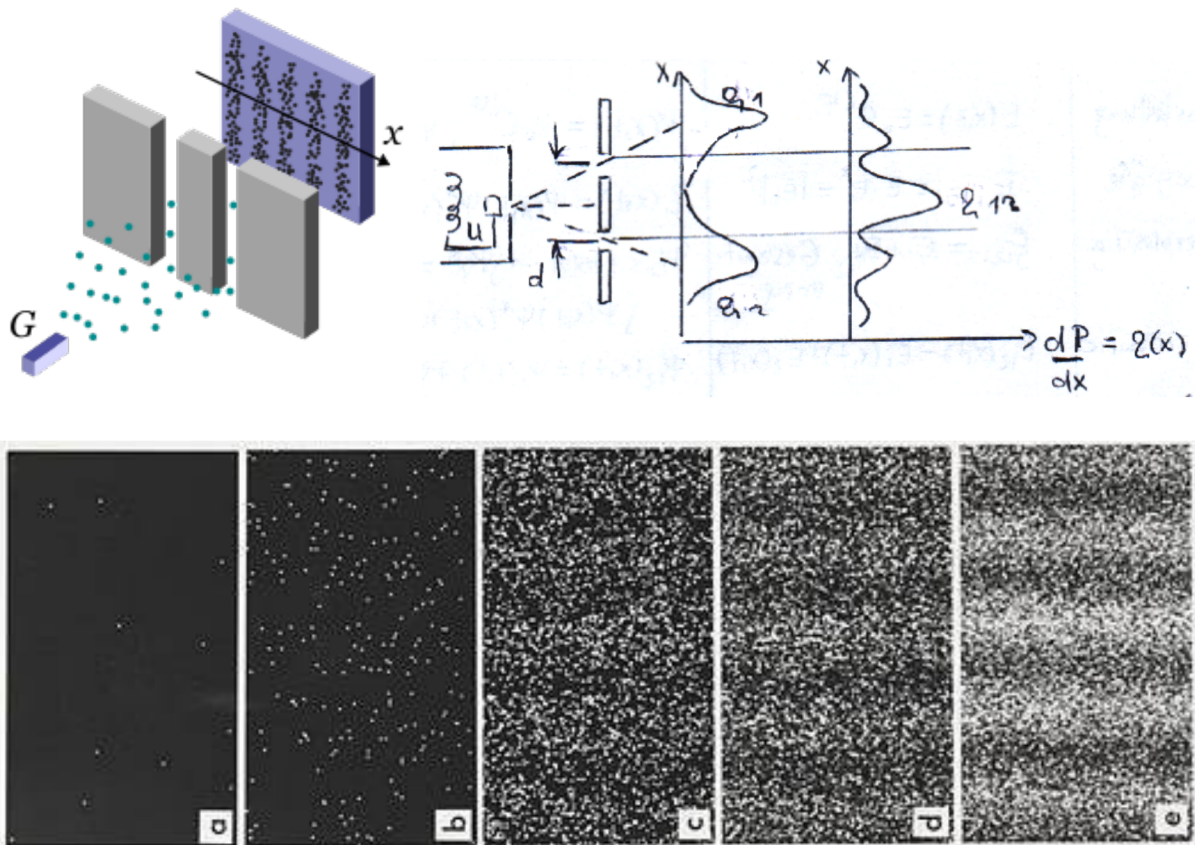


Abbildung 2.6: Doppelspaltexperiment mit Mikroteilchen. Oben links: Schematische Darstellung. Elektronen (Punkte) werden von der Quelle G ausgesandt. Rechts: Die Mittelung über viele Einzelereignisse führt zu den Wahrscheinlichkeitsdichten $\rho(x)$. Unten: Aufnahmen aus dem Experiment von Tonomura *et al.* für wachsende Zahl N wiederholter Messereignisse: a: $N = 11$, b: 200, c: 6000, d: 40.000, e: 140.000. Aus Referenz [Tonomura et al., 1989].

⁴Im Rahmen der Planckschen Feldquantisierung liegt hier natürlich auch eine diskrete Emission vor.

Wir nehmen also wieder N wiederholte Messungen vor, wobei die Einzelereignisse diskret und zufällig sind. Anschließend mitteln wir den Auftreffort über sehr viele Messungen ($N \rightarrow \infty$) und erhalten quasikontinuierliche Ergebnisse:

1. $\rho_1(x) = \frac{dP_1}{dx}$, Wahrscheinlichkeitsdichte bei geschlossenem Spalt 2.
2. $\rho_2(x) = \frac{dP_2}{dx}$, Wahrscheinlichkeitsdichte bei geschlossenem Spalt 1.
3. Sind beide Spalte offen, so misst man:

$$dP_{1,2} \neq dP_1 + dP_2$$

Hier gilt also offensichtlich keine Additivität, sondern Interferenz (dies basiert auf der Beobachtung im Experiment, s. Abb. 2.6). Es liegt also eine gegenseitige Beeinflussung der beiden Spalte vor, und $dP_{1,2}$ verhält sich wie die Intensität $I_{1,2}$ bei der elektromagnetischen Welle.

Das Experiment zeigt also sowohl diskrete Teilcheneigenschaften – wie Masse oder Elementarladung – als auch Interferenzeffekte, welche den Welleneigenschaften zuzuordnen sind. Die Vermutung ist nun, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte ähnliche Eigenschaften hat wie die Intensität des elektromagnetischen Feldes. In Analogie zur Interferenz der Intensität muss auch hier ein analoger Zusammenhang bestehen, der zur beobachteten Interferenz führt:

$$\rho_{1,2} = \rho_1 + \rho_2 + 2|\psi_1| \cdot |\psi_2| \cos \Delta\varphi,$$

wobei die Funktion ψ ad hoc als “Wahrscheinlichkeitsamplitude”, in Analogie zur Feldamplitude der elektromagnetischen Welle eingeführt wurde. Hieraus lassen sich dann weitere Analogien ableiten, die wir in folgender Tabelle zusammenstellen.

	EM-Welle	Mikroteilchen
Darstellung	$\underline{E}(\underline{r}, t) = \underline{E}_0 e^{i\varphi(\underline{r}, t)}$	$\psi(\underline{r}, t) = \psi_0 e^{i\varphi(\underline{r}, t)}$
Messgröße	$\alpha \cdot I(\underline{r}, t) = E(\underline{r}, t) \cdot E^*(\underline{r}, t)$	$\rho(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}, t) \cdot \psi^*(\underline{r}, t)$
Normierung	$\int I(\underline{r}) d\underline{r} \propto W_{el}$	$\int \rho(\underline{r}, t) d\underline{r} = \int dP = 1$
Superposition	$\underline{E}_{12}(\underline{r}, t) = \underline{E}_1(\underline{r}, t) + \underline{E}_2(\underline{r}, t)$	$\psi_{12}(\underline{r}, t) = \psi_1(\underline{r}, t) + \psi_2(\underline{r}, t)$
Addition der Messgrößen	$I_{12} = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1}\sqrt{I_2} \cos \Delta\varphi$	$\rho_{12} = \rho_1 + \rho_2 + 2 \psi_1 \cdot \psi_2 \cos \Delta\varphi$

Tabelle 2.2: Analogie zwischen den Grundgrößen zur Beschreibung von Mikroteilchen und EM-Wellen. Der Koeffizient α wurde in Formel (2.9) eingeführt.

Also ersetzt eine elementare Beschreibung der Welleneigenschaften von Mikroteilchen mit einer Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi(\underline{r}, t)$ die klassischen Trajektorien. Wir haben also im Gegensatz zur klassischen Mechanik eine *räumliche Delokalisierung* vorliegen. Offen ist nun noch die Bewegungsgleichung für $\psi(\underline{r}, t)$. Diese finden wir im Abschnitt 2.5. Vorher diskutieren wir aber noch einmal die Analogie zwischen dem Verhalten elektromagnetischer Strahlung und von Mikroteilchen.

Statistische Interpretation der Interferenz bei Licht: Die Beobachtung von Interferenz in der *kontinuierlichen* Messgröße Intensität, I , ist nur auf den ersten Blick qualitativ verschieden von der Wahrscheinlichkeitsbetrachtung bei den Mikroteilchen. Wenn wir uns an Plancks

Lichtquanten-Hypothese erinnern, vgl. Abschnitt 1.3.1, bedeutet das, dass auch bei der Beobachtung von Interferenz bei Licht ein diskreter Teilchenstrom zugrunde liegt. Die Intensität ist dann proportional zur Anzahl der Photonen pro Fläche und Zeit, $I \sim N\hbar\omega$, wenn monochromatische Strahlung vorliegt. Wenn man jetzt die Zahl der Photonen kontinuierlich reduziert, sollte – wie im Fall der Mikroteilchen – das Interferenzbild unscharf werden und der zufällige Charakter einzelner Photonen deutlich werden. Genau das ist experimentell zu beobachten, wie in Abbildung 2.7 gezeigt. Die Abbildung zeigt die Fotografie ein und desselben Objekts bei sechs verschiedenen Belichtungszeiten, was einer Variation der Photonenzahl entspricht.



Abbildung 2.7: Teilchencharakter des Lichts bei der Fotografie. Das Foto wurde mit unterschiedlicher Belichtungszeit durchgeführt. Dadurch nahm die Zahl der Photonen von 3,000 (links oben) auf 30,000,000 (rechts unten) zu. Quelle: https://www.uni-ulm.de/fileadmin/website_uni_ulm/nawi.inst.251/

2.5 Die Schrödingergleichung

Nach den vorigen Ergebnissen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Mikroteilchens am Ort $\underline{r}$ im Volumen ΔV bestimmt durch die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\underline{r}, t) = |\psi(\underline{r}, t)|^2$. Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen i im Volumen $\Delta V \subset \mathcal{V}$ zu finden, ist dann:

$$P(i \in \Delta V) = \int_{\Delta V} |\psi(\underline{r}, t)|^2 d\underline{r}. \quad (2.10)$$

Für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Gesamtvolumen $\mathcal{V}$ (sicheres Ereignis) gilt dann:

$$\int_{\mathcal{V}} \psi(\underline{r}) \psi^*(\underline{r}) d\underline{r} = 1$$

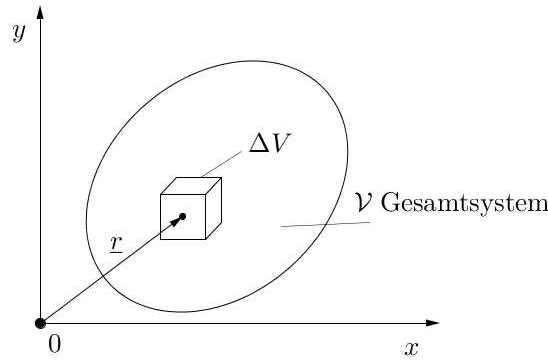


Abbildung 2.8: Volumen ΔV im Gesamtsystem $\mathcal{V}$. Die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen im Volumen ΔV zu finden, ist durch Formel (2.10) gegeben.

Wir versuchen nun, die Bewegungsgleichung für $\psi(\underline{r}, t)$ zu finden. Dies werden wir wieder in Analogie zur Elektrodynamik tun. Nehmen wir zunächst den eindimensionalen Fall einer ebenen monochromatischen Welle für das elektrische Feld⁵:

$$\underline{E}(x, t) = \underline{E}_0 e^{-i\omega t + ikx}. \quad (2.11)$$

Diese Funktion löst die Wellengleichung, die aus den Maxwellgleichungen folgt:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 E}{\partial x^2}. \quad (2.12)$$

Die Bedingung dafür, dass der Ausdruck (2.11) die Wellengleichung löst, ist gegeben durch die sogenannte *Dispersionsrelation*, welche man durch Einsetzen findet:

$$\omega(k) = c \cdot k. \quad (2.13)$$

Das heißt, für elektromagnetische Wellen existiert zwingend ein linearer Zusammenhang zwischen Frequenz und Wellenzahl.

Jetzt erfolgt die Übertragung dieser Ergebnisse auf Mikroteilchen. Da wir hier analoge Interferenzeffekte beobachtet haben, ist die Lösung durch die selbe monochromatische ebene Welle gegeben. Aus den bereits besprochenen Experimenten zu den Eigenschaften von Mikroteilchen wissen wir, dass Frequenz und Wellenzahl mit der Energie bzw. dem Impuls verknüpft sind:

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad k = \frac{p}{\hbar}.$$

Setzen wir dies ein, so erhalten wir ψ für ein Mikroteilchen:

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{-i\frac{E}{\hbar}t + i\frac{p}{\hbar}x}. \quad (2.14)$$

Wir wissen jedoch auch, dass die Dispersion für nicht-relativistische Teilchen quadratisch ist:

$$E(p) = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.15)$$

Dies ist ein grundlegender Unterschied zur elektromagnetischen Welle. Die Bewegungsgleichung für ψ muss also von der Wellengleichung für das elektromagnetische Feld abweichen. Um diese Bewegungsgleichung zu finden, berechnen wir aus der Wellenlösung (2.14):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} E \cdot \psi, \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= -\frac{1}{\hbar^2} p^2 \cdot \psi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \psi, \end{aligned}$$

⁵Das ist keine Einschränkung, denn wegen der Linearität der Maxwell-Gleichungen lässt sich eine beliebige Lösung durch Superposition solcher Funktionen darstellen.

wobei wir in der letzten Zeile die Dispersionsrelation (2.15) verwendet haben. Formen wir die linken Seiten so um, dass wir die rechten Seiten gleichsetzen können (wir lösen auf nach $E\psi$), so erhalten wir die von *E. Schrödinger* 1926 gefundene Gleichung. Wir verallgemeinern sofort auf dreidimensionale Probleme:

Schrödingergleichung (SGL) für ein freies Teilchen:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\underline{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\underline{r}, t) \quad (2.16)$$

Die Lösung dieser Gleichung kennen wir ja bereits. Zur vollständigen Lösung brauchen wir nun noch Anfangsbedingungen $[\psi(\underline{r}, t = 0)]$ und Randbedingungen $[\psi(\underline{r}, t)|_{\Gamma}, \nabla \psi(\underline{r}, t)|_{\Gamma}]$. Hierbei ist Γ der Rand des dem Teilchen zur Verfügung stehenden Volumens. Die obige Gleichung ist—anders als für elektromagnetische Wellen—von 1.Ordnung in t . Sie ähnelt damit der Diffusionsgleichung, und wir werden in der Tat später ein Auseinanderlaufen der Wellenfunktion mit der Zeit sehen.

Die Schrödingergleichung ist in ihrer Analogie zur Elektrodynamik gut begründbar aber nicht ableitbar im strengen Sinne⁶. Sie ist das Grundpostulat der Quantenmechanik, so wie die Newtonschen Gleichungen die Grundpostulate für die klassische Mechanik darstellen.

Von der obigen Lösung dieser Gleichung können wir den Zeitanteil zum Parameter E separieren:

$$\psi(\underline{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \cdot \psi_E(\underline{r})$$

Setzen wir dies in die Schrödingergleichung ein, so erhalten wir eine Bestimmungsgleichung für die stationäre Lösung:

$$\begin{aligned} i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} E \right) e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \psi_E(\underline{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_E(\underline{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \\ E \psi_E(\underline{r}) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_E(\underline{r}) \end{aligned}$$

Die *stationäre Schrödingergleichung* ist gegeben durch:

$$E \psi_E(\underline{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_E(\underline{r}) \quad (2.17)$$

Bisher haben wir nur freie Teilchen betrachtet. Jetzt wollen wir die Schrödinger-Gleichung auf Teilchen in einem externen Feld erweitern. Die **zentrale Hypothese** ist, dass man die Energie, welche bisher nur durch die kinetische Energie gegeben war, durch die Gesamtenergie ersetzt: $E \rightarrow E + V(\underline{r})$. Dabei ist, nach Glg. (2.17), die kinetische Energie offenbar durch den Ausdruck $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ gegeben,

Die *stationäre Schrödingergleichung* für ein Teilchen im externen Potential $V(\underline{r})$ ist:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\underline{r}) \right] \psi_E(\underline{r}) = E \psi_E(\underline{r}) \quad (2.18)$$

⁶Dafür würde man noch grundlegendere Postulate benötigen.

Die zeitabhängige Schrödingergleichung für ein Teilchen im externen Potential $V(\underline{r})$ ist:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\underline{r}) \right] \psi(\underline{r}, t) \quad (2.19)$$

Die obigen Gleichungen sind lediglich Postulate. Diese sind aber sehr gut durch Experimente bestätigt und sind auch für künftige Anwendungen weiter zu überprüfen.

Eigenschaften der Schrödingergleichung: Betrachten wir ein paar Eigenschaften der oben besprochenen Schrödingergleichung.

1. Die Lösung hat die Form

$$\psi_E(\underline{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E \cdot t} \psi_E(\underline{r})$$

2. Die Linearität der Schrödingergleichung liefert das Superpositionsprinzip. Sind also ψ_1 und ψ_2 Lösungen der Schrödingergleichung, so ist auch

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$$

mit beliebigen komplexen Koeffizienten $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ Lösung der Schrödingergleichung.

3. Wegen der Normierungsbedingung

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

erhält die Schrödingergleichung die Teilchenzahl. Dies ist die globale Teilchenzahlerhaltung. In Analogie zur Elektrodynamik betrachten wir nun eine lokale Teilchenzahlbilanz bzw. Wahrscheinlichkeitsdichtebilanz. In der Elektrodynamik galt:

$$\frac{\partial \rho_L}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{j}_L = 0,$$

wobei ρ_L die Ladungsdichte und $\underline{j}_L$ die Ladungsstromdichte bezeichnen. Wir beweisen nun die folgende Behauptung.

Behauptung: Ist ρ die *Wahrscheinlichkeitsdichte* und $\underline{j}(\underline{r}, t)$ die *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*, mit

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

so erfüllen ρ und $\underline{j}$ die *Kontinuitätsgleichung*.

Beweis:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = \frac{\partial}{\partial t} (\psi \psi^*) = \dot{\psi} \psi^* + \psi \dot{\psi}^*$$

Die komplex konjugierte Schrödingergleichung ist:

$$-i\hbar \dot{\psi}^* = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \psi^*.$$

Setzt man diese und die ursprüngliche Schrödingergleichung oben ein, so erhält man:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho &= -\frac{i}{\hbar} \left[\psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi - \psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi^* \right] \\
 &= -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*] \\
 &= -\frac{i\hbar}{2m} [\nabla(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - (\nabla \psi^* \nabla \psi - \nabla \psi \nabla \psi^*)] \\
 &= -\frac{i\hbar}{2m} \operatorname{div}(-\psi^* \nabla \psi + \psi \nabla \psi^*),
 \end{aligned}$$

was zu zeigen war.

Wir fassen zusammen:

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ und die Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\underline{j}$ mit:

$$\rho(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}, t) \psi^*(\underline{r}, t) \quad (2.20)$$

$$\underline{j}(\underline{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (2.21)$$

erfüllen die *Kontinuitätsgleichung*:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div} \underline{j} = 0 \quad (2.22)$$

4. Die Schrödingergleichung ist **reversibel** (zeitumkehr-invariant), wie auch die Gleichungen der klassischen Mechanik und der Elektrodynamik. Betrachte hierzu die Lösung:

$$\psi(\underline{r}, t) = \psi_E(\underline{r}) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

Die Ersetzung

$$t \rightarrow -t$$

führt dann zu

$$\psi \rightarrow \psi^*.$$

Hierbei tritt nur eine Änderung der Phase auf, welche nicht messbar ist. Die messbare Wahrscheinlichkeitsdichte ändert sich nicht, $\rho(\underline{r}, t) \rightarrow \rho(\underline{r}, -t)$. Die ebenfalls messbare Stromdichte ändert allerdings ihr Vorzeichen, $\underline{j}(\underline{r}, t) \rightarrow -\underline{j}(\underline{r}, -t)$, wie man direkt aus der Definition (2.21) ersehen kann⁷. Damit bleibt auch die Kontinuitätsgleichung invariant gegenüber Zeitumkehr.

5. Wir können die Schrödingergleichung auch in Operatorform schreiben, wenn wir den sogenannten **Hamiltonoperator** definieren:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\underline{r}) \quad (2.23)$$

⁷Dies ist analog zum Vorzeichenwechsel der elektrischen Stromdichte und hängt mit der Richtungsänderung der Geschwindigkeit zusammen.

Dieser ist die quantenmechanische Verallgemeinerung der Hamilton-Funktion, $H = T + V$. Hieraus kann man den Operator der kinetischen Energie ablesen:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2. \quad (2.24)$$

Wegen der Analogie zur klassischen Mechanik erwarten wir $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ und können den Impulsoperator ablesen:

$$\hat{\underline{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla. \quad (2.25)$$

Die Schrödingergleichung in Operatorform sieht dann wie folgt aus:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\underline{r}, t) = \hat{H}\psi(\underline{r}, t)$$

6. Betrachten wir nun die stationäre Schrödingergleichung in Operatorform:

$$\hat{H}\psi_E(\underline{r}, t) = E\psi_E(\underline{r}, t). \quad (2.26)$$

Hierbei ist ψ_E die stationäre Lösung zum Parameter E . Gleichung (2.26) ist also eine **Eigenwertgleichung** des Hamiltonoperators $\hat{H}$. Die Lösungen einer solchen Gleichung sind Paare aus einer Eigenfunktion $\psi_E(\underline{r}, t)$ und einem Eigenwert E :

$$\{E, \psi_E\}$$

Die Interpretation ist nun, dass die Eigenwerte E die möglichen Energiewerte sind, die zu der zugehörigen Eigenfunktion $\psi_E(\underline{r}, t)$, die die jeweilige Ortswahrscheinlichkeit bestimmt, korrespondieren. Nun gibt es zwei Fälle:

- (a) Die Energiewerte sind diskret verteilt. Dies tritt z.B. im H-Atom auf (gebundene Zustände), in denen die diskreten Bohrschen Bahnen (ihre Verallgemeinerung) streng aus der Lösung des Eigenwertproblems folgen.
 - (b) Die Energieverteilung ist kontinuierlich. Ein freies Teilchen kann beispielsweise jede Energie annehmen.
7. Wir müssen noch einige physikalische bzw. mathematische Anforderungen an ψ stellen, damit wir dem Wahrscheinlichkeitscharakter von ψ und damit ρ gerecht werden.
- (a) Die Lösung muss für gegebene Anfangs- und Randbedingungen eindeutig sein.
 - (b) Wir erwarten Stetigkeit von ψ und $\nabla\psi$, damit auch ρ und $\underline{j}$ stetig sind.
 - (c) Da wir ψ als Wahrscheinlichkeitsamplitude verstehen, muss

$$|\operatorname{Re} \psi| < \infty, \quad |\operatorname{Im} \psi| < \infty$$

gelten.

- (d) Da mit der Normierung in einem Volumen $\mathcal{V}$ für alle Zeiten t

$$\int \rho(\underline{r}, t) d\underline{r} = 1,$$

gilt, umfasst die Menge aller ψ nur quadrat-integrable-Funktionen.

8. Da aufgrund der statistischen Natur der Quantenmechanik nur Mittelwerte von Größen physikalische Relevanz haben und wir solchen Größen einen Operator zuordnen können, ist der Mittelwert einer Größe A (Erwartungswert) wie folgt zu berechnen⁸:

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \psi^*(\underline{r}) \hat{A} \psi(\underline{r}) d^3r.$$

⁸Dies zeigen wir genauer im nächsten Kapitel.

2.6 Zeitverhalten eines freien Quanten-Teilchens

Wir betrachten in diesem Abschnitt ein Teilchen, welches nicht mit einem Potential wechselwirkt, also gilt $V(r) = 0$, und die Schrödinger-Gleichung nimmt folgende Form an:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\underline{r}, t).$$

Bei $t = 0$ sei die Wahrscheinlichkeitsamplitude durch $\psi_0(\underline{r})$ gegeben. Uns interessiert nun die Zeitentwicklung. Bevor wir diese errechnen, überlegen wir uns das qualitative Verhalten. Auf der rechten Seite der obigen Schrödinger-Gleichung tritt im eindimensionalen Fall die zweite Ableitung der Funktion ψ auf. Die zweite Ableitung einer Funktion stellt ihre Krümmung (mal -1) dar. Im unten stehenden Bild sind zur Illustration eine gaußförmige Funktion und ihre zweite Ableitung skizziert.

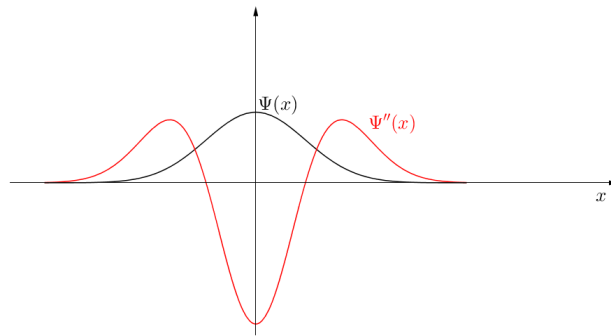


Abbildung 2.9: Gaußförmige (reelle) Wellenfunktion und ihre zweite Ableitung

Betrachten wir nun die linke Seite der Schrödinger-Gleichung und schauen wir uns den Grenzwert für große Zeiten an, bei dem die zeitliche Änderung verschwindet, so muss für alle $\underline{r}$ gelten:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\underline{r}, t) = 0.$$

Also ist im Endzustand die erste Ableitung der Wellenfunktion im Ortsraum konstant (1-dimensionaler Fall):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) = \text{const.}$$

Im Zeitverlauf reduziert sich also die Krümmung unserer Wellenfunktion immer mehr.

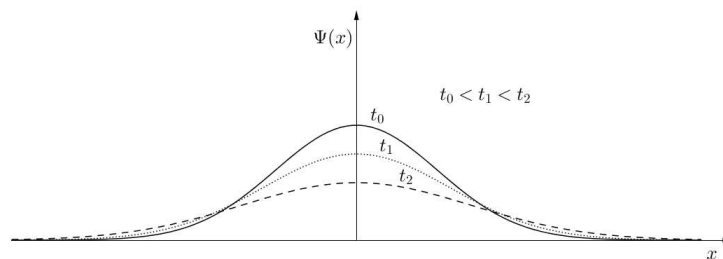


Abbildung 2.10: Verbreiterung der Wellenfunktion im Ortsraum

Die asymptotische Lösung sollte also eine flache Kurve sein, die Wellenfunktion “zerfließt”. Dabei bleibt das Wellenpaket natürlich immer auf einen endlichen Raumbereich beschränkt, in dem die Wellenfunktion einen nahezu konstanten Wert annimmt.⁹

⁹Man beachte, dass eine Ausdehnung einer konstanten Wahrscheinlichkeitsdichte auf ein unendliches Volu-

2.6.1 Lösung im Fourier-Raum

Bei der genauen Berechnung der Wellenfunktion eines freien Teilchen können wir auf die Fourier-Transformation zurückgreifen. Wir wissen bereits vom Doppelspalt, dass ψ_0 in der Form einer ebenen Welle die beobachtete Interferenz am Doppelspalt erklärt und gleichzeitig die Schrödingergleichung löst. Die Gesamtheit der ebenen Wellen bildet ein vollständiges abgeschlossenes Funktionensystem (s. Analysis). Man kann also jede Lösung der Schrödingergleichung aus (i.a. unendlich vielen) Partialwellen überlagern. Zum Beispiel können wir die Gaußfunktion in Abbildung 2.9 als Überlagerung von Partialwellen darstellen. Eine solche Funktion stellt eine gute Modellvorstellung eines freien Teilchens dar, das den klassischen Limes (Punktteilchen ergibt sich bei Breite gegen Null) direkt enthält. Umgekehrt entspricht eine ebene Welle dem Limes Breite gegen Unendlich. Es bleibt zu klären, wie die Breite des Wellenpaketes mit physikalischen Eigenschaften des Teilchens zusammenhängt.

Fouriertransformation: Transformieren wir also die Ortsabhängigkeit in den Fourier-Raum (Wellenzahl-Raum), wobei wir uns auf eine Dimension beschränken¹⁰:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k, t) e^{ikx}.$$

Dies setzen wir in die obige Schrödinger-Gleichung ein:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k, t) e^{ikx} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k, t) e^{ikx} \\ i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(k, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}(k, t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{ikx} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} k^2 \tilde{\psi}(k, t) e^{ikx} \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(k, t) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi}(k, t). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Beim letzten Schritt haben wir ausgenutzt, dass Exponentialfunktionen zu verschiedenen k unabhängig voneinander sind (orthogonales Funktionensystem). Das bedeutet, dass linke und rechte Seite für jedes k separat übereinstimmen müssen. Dann können wir das Integral und den gemeinsamen e-Faktor weglassen.

Die Schrödinger-Gleichung im k -Raum ist also entkoppelt, d.h. Lösungen für unterschiedliche k sind voneinander unabhängig (das ist eine Konsequenz der Linearität der Schrödingergleichung).

Zeitabhängige Lösung: Die zeitabhängige Lösung dieser entkoppelten Differentialgleichung finden wir nun wieder einfach über einen e-Ansatz:

$$\tilde{\psi}(k, t) = A(k) \cdot e^{-i\omega(k)t}, \quad (2.28)$$

wobei A und ω zunächst unbestimmte Koeffizienten sind, die jedoch von unserem Parameter k abhängen können. Einsetzen von (2.28) in Gleichung (2.27) liefert:

$$\begin{aligned} i\hbar(-i)\omega(k) \cdot A(k) \cdot e^{-i\omega(k)t} &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} A(k) \cdot e^{-i\omega(k)t} \\ \hbar\omega(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{aligned}$$

men auf eine nicht-normierbare Wahrscheinlichkeitsdichte führen würde. Dieser Fall ist aber physikalisch nicht relevant.

¹⁰Die Wahl des Faktor $\frac{1}{2\pi}$ ist nicht eindeutig. Bei unserer Wahl taucht in der Rücktransformation der Faktor 1 auf. Alternativ werden häufig in beiden Transformationen symmetrische Faktoren $\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}$ verwendet.

Damit haben wir wieder die Dispersionsrelation eines nichtrelativistischen Teilchens reproduziert. Nun müssen wir noch den Vorfaktor $A(k)$ aus der Anfangsbedingung gewinnen. Zur Zeit $t = 0$ gilt im Ortsraum:

$$\psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$$

Setzen wir diese Größe in die Fourier-Transformation ein, so erhalten wir die Anfangsbedingung im k -Raum:

$$\tilde{\psi}(k, t = 0) = \tilde{\psi}_0(k)$$

Mit $t = 0$ kann man $\tilde{\psi}_0(k)$ mit dem Vorfaktor $A(k)$ identifizieren, so dass die zeitabhängige Lösung im k -Raum die Form

$$\tilde{\psi}(k, t) = \tilde{\psi}_0(k) \cdot e^{-i\omega(k)t},$$

erhält. Für die zeitabhängige Lösung im Ortsraum ist nun $\tilde{\psi}(k, t)$ zurück zu transformieren. Die Rücktransformation geben wir hier in drei Dimensionen an:

$$\psi(\underline{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \tilde{\psi}_0(k) e^{i\{\underline{k} \cdot \underline{r} - \omega(k)t\}}.$$

2.6.2 Lösung für eine Gauss-Anfangsbedingung

Beschränken wir uns nun wieder auf den eindimensionalen Fall einer ebenen Welle in x -Richtung. Die Fouriertransformation von oben nimmt dann die Form

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \tilde{\psi}_0(k) e^{i\{kx - \omega(k)t\}},$$

an mit der Dispersionsrelation $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$. Als Beispiel behandeln wir nun ein Gauss-förmiges Wellenpaket im Impulsraum,

$$\tilde{\psi}_0(k) = C e^{-\frac{1}{4}\sigma^2(k-k_0)^2 - ikx_0}, \quad (2.29)$$

mit der zugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichte im k -Raum

$$\tilde{\rho}(k) \equiv |\tilde{\psi}_0(k)|^2 = |C|^2 e^{-\frac{\sigma^2}{2}(k-k_0)^2}$$

Die Gauss-Verteilung beschreibt eine Überlagerung monochromatischer Wellen, die um k_0 zentriert sind, wobei die Breite der Verteilung durch σ^{-1} gegeben ist. Setzen wir die Anfangsbedingung (2.29) in die Fourier-Transformation ein, so erhalten wir die folgende zeitabhängige Lösung im Ortsraum:

$$\psi(x, t) = \frac{C}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} e^{-\frac{\sigma^2}{4}(k-k_0)^2 + i[k(x-x_0) - \omega(k)t]}.$$

Wir entwickeln nun $\omega(k)$ um die Frequenz am Peak, $k = k_0$ (die "Trägerfrequenz" $\omega_0 = \omega(k_0)$). Die Taylorreihe ist nach dem quadratischen Term bereits exakt, da die dritte Ableitung von ω nach k gleich Null ist:

$$\begin{aligned} \omega(k) &= \frac{\hbar k^2}{2m} = \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 \\ &= \omega_0 + v_G(k - k_0) + \beta(k - k_0)^2 \end{aligned}$$

Hierbei wurden die folgenden Größen definiert:

$$\begin{aligned}\omega_0 &= \frac{\hbar k_0^2}{2m}, \\ v_G &= \frac{\hbar k_0}{m}, \\ \beta &= \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m},\end{aligned}$$

wobei v_G die übliche Gruppengeschwindigkeit einer Welle bezeichnet. Damit schreibt man die Wellenfunktion, mit der Substitution $k' = k - k_0$, zu:

$$\psi(x, t) = \frac{C}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\underbrace{\left(\frac{\sigma^2}{4} + i\beta t\right)}_{:=a} k'^2 + i\underbrace{[(x - x_0) - v_G t]}_{:=b} k'} \cdot e^{i[k_0(x - x_0) - \omega_0 t]} dk'$$

Die zweite e -Funktion des obigen Integrals stellt die monochromatische Träger-Welle dar. Ist der Realteil von a größer als Null, so gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2 + bx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-a\left(x - \frac{b}{2a}\right)^2} e^{\frac{b^2}{4a}} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \cdot e^{\frac{b^2}{4a}}.$$

Benutzt man dieses Integral, so folgt:

$$\psi(x, t) = \frac{C}{2\pi} e^{i[k_0(x - x_0) - \omega_0 t]} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sigma^2}{4} + i\beta t}} e^{-\frac{(x - x_0 - v_G t)^2}{\sigma^2 + 4i\beta t}} \quad (2.30)$$

Im Grenzfall, dass $4\beta t$ gegen die übrigen Terme vernachlässigt werden kann, identifizieren wir die **Phasengeschwindigkeit** v_{ph} durch:

$$k_0(x - x_0) - \omega_0 t = \text{const} \Rightarrow v_{ph} = \frac{\omega_0}{k_0} \quad (2.31)$$

und die **Gruppengeschwindigkeit** v_G als die Geschwindigkeit, mit der sich die Gauß-förmige Funktion verschiebt.

Berechnen wir nun die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum. Das Betragsquadrat von Gleichung (2.31) ergibt

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{|C|^2}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\sigma^4 + 16\beta^2 t^2}} e^{-2\sigma^2 \frac{(x - x_0 - v_G t)^2}{\sigma^4 + 16\beta^2 t^2}}.$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum ist also auch Gauß-förmig. Das Maximum, beziehungsweise der Schwerpunkt des Wellenpaketes, verschiebt sich mit der Gruppengeschwindigkeit v_G gleichförmig:

$$\begin{aligned}x_{max} - x_0 - v_G t &= 0 \\ x_{max}(t) &= x_0 + v_G t\end{aligned}$$

Die Breite der Wahrscheinlichkeitsdichte, Δx , nimmt mit der Zeit zu. Das Wellenpaket zerfließt also. Ein Vergleich mit

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta x)^2}} e^{-\frac{(x - x_0 - v_G t)^2}{2(\Delta x(t))^2}},$$

liefert durch Ablesen für die doppelte Varianz

$$2(\Delta x)^2 = \frac{\sigma^4 + 16\beta^2 t^2}{2\sigma^2},$$

woraus sich die Standardabweichung (“Unschärfe”) des Ortes im Zustand $\psi(x, t)$ ergibt:

$$\Delta x(t) = \sqrt{\frac{\sigma^2}{4} + \frac{4\beta^2}{\sigma^2} t^2}. \quad (2.32)$$

Die Breite des Wellenpaketes nimmt also mit der Zeit t zu, das Wellenpaket “zerfließt”, wie bereits zu Beginn vermutet. Für große Zeiten wächst die Standardabweichung linear mit der Zeit, genauso wie bei der Diffusion eines klassischen Teilchens.

Aufgabe: Man bestimme die Unschärfe im Orts- und Impulsraum und untersuche die Heisenberg-Unschärfe-Relation. Wie hängt das Unschärfeprodukt von k_0 und von der Zeit ab?

Aufgabe: Man wiederhole die Rechnung für eine exponentiell abfallende Anfangsverteilung.

2.7 Endliche räumliche Ausdehnung von Mikroteilchen

Wir hatten bereits in Abschnitt 1.1 gesehen, dass sich die Probleme der klassischen Beschreibung von Mikroteilchen beheben lassen, wenn die Teilchen eine endliche Ausdehnung besitzen würden. Mathematisch kann dies durch ein Wellenpaket dargestellt werden. Den Zusammenhang zwischen Breite des Paketes im Orts- und Impulsraum diskutieren wir im nächsten Abschnitt. Die physikalische Ursache dieser endlichen Breite sind verknüpft mit der Unschärferelation (die diskutieren wir ausführlich später). Mathematisch folgt die endliche Breite bereits aus der Fouriertransformation, die Ort und Impuls (sowie Zeit und Frequenz) verknüpft.

2.7.1 Wahrscheinlichkeitsamplitude und Unschärfe

Wir wollen qualitativ noch einmal den Begriff der Unschärfe aufgreifen.

A) klassisches Teilchen: Für ein klassisches Teilchen lassen sich “im Prinzip” die Ortsunschärfe (oder Ortsungenauigkeit) Δr und die Impulsunschärfe Δp beliebig verkleinern (im Rahmen der klassischen Mechanik wird angenommen, dass der aktuelle Phasenraumpunkt eines Teilchens beliebig genau bestimmbar ist). Dies ist mit der oben betrachteten Lösung der Schrödingergleichung für das (typische) Beispiel eines Gaußschen Wellenpaketes nicht vereinbar.

B) freies Mikroteilchen: Unsere erste Beschreibung eines freien Mikroteilchens hatten wir an Hand des Doppelspaltexperiments mit einer ebenen Welle realisiert. Nun betrachten wir eine ebene Lichtwelle:

$$\underline{E}(x, t) = \underline{E}_0 e^{-i\omega t + ikx}$$

Hierbei haben wir nur einen freien Parameter, da

$$\omega(k) = c \cdot k$$

als Lösbarkeitsbedingung für die Maxwell-Gleichung folgte. Wir bestimmen nun die Frequenz ω und die Wellenzahl k für Mikroteilchen und bringen die Interferenzbilder für Licht und Teilchen