## 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 $\psi$ 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.

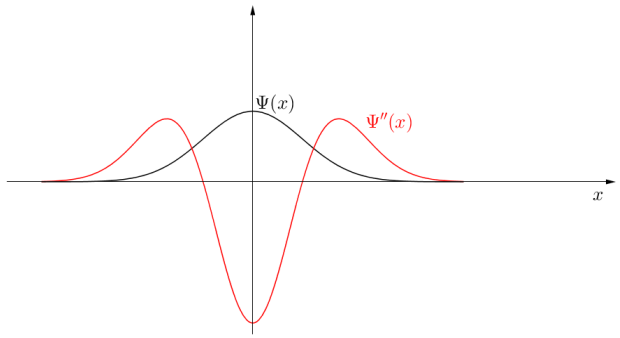



Abbildung 2.9: Gaußförmige (reelle) Wellenfunktion und ihre zweite Ableitung

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:

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

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

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

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

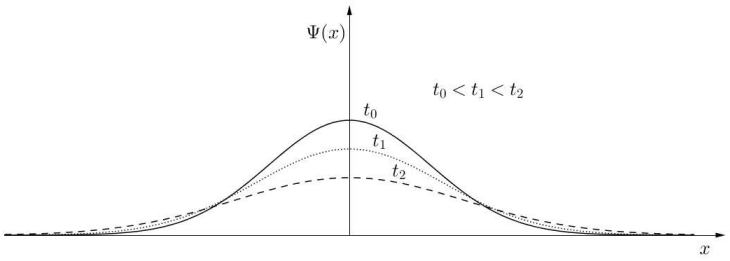



Abbildung 2.10: Verbreiterung der Wellenfunktion im Ortsraum

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.[11]

[11] Man 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 $\psi_0$ in der Form einer ebenen Welle die beobachte 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 (ein "Punktteilchen" würd sich ergeben, wenn die Breite gegen Null geht) 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 beschränken[12]:

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

Dies setzen wir in die obige Schrödinger-Gleichung ein:

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

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(k,t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\, \tilde{\psi}(k,t)\,. \tag{2.28}$$

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:

$$\tilde{\psi}(k,t) = A(k) \cdot e^{-i\omega(k)t}, \tag{2.29}$$

wobei $A$ und $\omega$ zunächst unbestimmte Koeffizienten sind, die jedoch von unserem Parameter $k$ abhängen können. Einsetzen von (2.29) in Gleichung (2.28) liefert:

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

$$\hbar\omega(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

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

[12] Die 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 nichtrelativstischen 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:

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

### 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,

$$\tilde{\psi}_0(k) = Ce^{-\frac{1}{4}\sigma^2(k-k_0)^2 - ikx_0}\,, \tag{2.30}$$

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 $\sigma^{-1}$ gegeben ist. Setzen wir die Anfangsbedingung (2.30) 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 $\omega$ nach $k$ gleich Null ist:

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