

Einführung in die Quantenphysik-Vorlesung 18

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Sommersemester

1. DIE ZUSAMMENFÜHRUNG DES WELLEN- UND DES TEILCHENSTANDPUNKTES

1.1. Deutung der Welleneigenschaften von Elektronen. Man stelle sich einen Elektronenstrahl mit geeigneter DE BROGLIE Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{p}$ vor, der durch einen Spalt geeigneter Breite trete. Die Elektronen bilden ein Beugungsmuster von Interferenzstreifen auf einem Fluoreszenzschirm oder auf einer Photoplatte. Die DE BROGLIE-Welle wird nun durch eine Wellenfunktion ψ dargestellt. Die Helligkeit auf dem Fluoreszenzschirm oder das Ausmaß der Schwärzung der Photoplatte ist nun proportional zu ψ^2 . ψ^2 ist damit auch proportional zur Zahl der Elektronen, die pro Sekunde (also pro Zeiteinheit) auf die Flächeneinheit des Schirms oder der Platte auftreten. Diese Zahl wiederum ist der Zahl von Elektronen pro Volumeneinheit n_e proportional, die sich in einem kleinen Raumbereich unmittelbar vor dem Schirm oder der Platte befinden:

Die Dichte der Elektronen in der unmittelbaren Nachbarschaft eines Punktes im Raum steht in direktem Zusammenhang mit dem Quadrat der Wellenfunktion in diesem Punkt:

$$n_e = \alpha \cdot \psi^2 \quad (1)$$

Die Proportionalitätskonstante α muss so gewählt werden, dass der Gesamtzahl der Elektronen, die über alle Bereiche des Raums addiert werden, gleich der Gesamtzahl der Elektronen ist, die überhaupt vorhanden ist.

1.2. Die Wahrscheinlichkeitsdeutung. Wir haben nun immer noch nicht ein vollständiges Verständnis für den Zusammenhang zwischen Teilchen und Wellen erlangt, denn man könnte die folgende verzwickte Frage stellen: Was würde geschehen, wenn man ein einzelnes Elektron ganz für sich allein durch den Spalt schicken würden? Würde es sich über das ganze Beugungsbild verteilen, oder würde es in einem bestimmten Punkt auf dem Schirm eintreffen? Wenn letzteres der Fall wäre, in welchem Punkt würde es auftreffen?

Die Quantenphysik sagt nun aus, dass das Elektron an einem bestimmten Punkt des Schirms auftrifft, man aber nur eine Wahrscheinlichkeitsaussage für jeden Punkt des Schirms machen kann. Die Wahrscheinlichkeit ein Elektron an einem Punkt \mathbf{r} bzw. in einem kleinen Volumen um diesen Punkt herum des Schirms zu messen ist proportional zum Quadrat seiner Wellenfunktion $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Eine graphische Darstellung von $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ soll das schon bekannte Interferenzmuster ergeben. Im Bereich des Hauptmaximums ist es dann wahrscheinlicher das Elektron nachzuweisen, als an einem Ort mit geringer Intensität. Schickt man also ein einzelnes Elektron durch den Spalt, so kann man nicht vorhersagen, wo es auftreffen wird. Man kann nur die Wahrscheinlichkeit für jeden einzelnen Punkt des Schirms dafür angeben, dass das Elektron in einem kleinen Volumen dort gemessen wird:

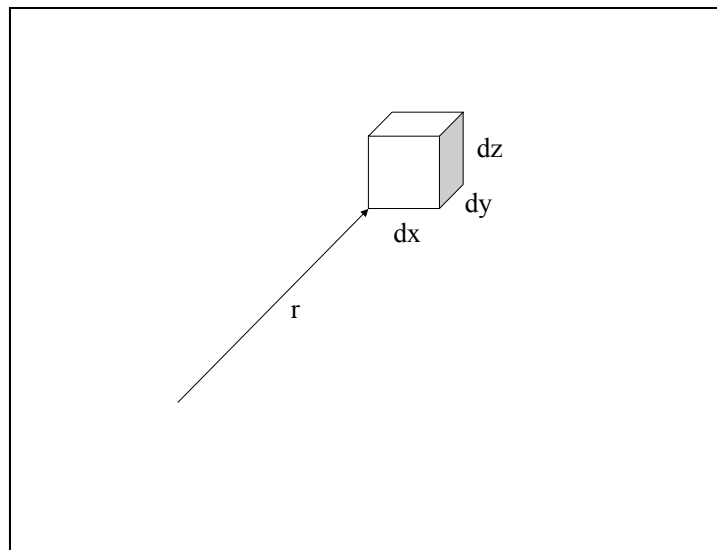


Figure 1: Darstellung eines infinitesimal kleinen Volumenelements.

Nun schicken wir also ein einzelnes Elektron durch den Spalt. Nach der Interpretation der Quantenphysik ist es völlig unmöglich vorherzusagen an welchem Ort des Schirms das Elektron auftrifft. Angenommen es wird in einem kleinen Volumen $d^3\mathbf{r}$ am Ort \mathbf{r}_1 auf den Schirm nachgewiesen. Anschließend schicken wir ein zweites Elektron durch den Spalt. Es könnte in einem Volumen $d^3\mathbf{r}$ am Ort \mathbf{r}_2 auf dem Schirm nachgewiesen werden. Ein drittes Elektron könnte in einem Volumen $d^3\mathbf{r}$ am Ort \mathbf{r}_3 nachgewiesen werden, ein viertes wieder in $d^3\mathbf{r}$ am Ort \mathbf{r}_1 . Wiederholen wir dieses

Experiment 1000000 mal, indem man 1000000 Elektronen einzeln durch den Spalt geschickt werden. Die Nachweiszahlen in den einzelnen Volumenelementen d^3r für jeden Ort r des Schirms werden die gleichen sein, wie bei der Zusammenfassung der 1000000 Elektronen zu einem Strahl, der dann auf den Spalt trifft. Bei z. B. 500000 dieser Einzelexperimente wird das Elektron in d^3r am Ort r_1 nachgewiesen, bei 10 Experimenten wird das Elektron in d^3r am Ort r_2 nachgewiesen usw, bis alle 1000000 Elektronen auch gezählt werden. Zu beachten ist allerdings, dass man nicht vorhersagen kann, welche Experimente das im einzelnen sein werden, bei denen ein Elektron in einem Volumenelement an einem bestimmten Ort nachgewiesen werden! Das Gesamtergebnis einer großen Zahl von solchen Experimenten ist jedoch vorhersagbar - wenn man $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ kennt.

Die DE BROGLIE-Welle ist eine Welle der Wahrscheinlichkeit! Sie wird dadurch beschrieben, dass man die Werte für $\psi(\mathbf{r}, t)$ in allen Punkten zu allen Zeiten angibt. Angenommen wir würden in einem bestimmten Punkt P des Schirms die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_P, t)$ kennen. Jetzt entwerfen wir ein Experiment zur Bestimmung des Ortes und wiederholen es N mal, wobei N eine sehr große Zahl ist. Dann messen wir bei einer Anzahl von:

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

das Elektron in der Nähe von r_P zu einem Zeitpunkt t . Es liegt auf der Hand, dass die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen in einem bestimmten kleinen Volumen anzutreffen, proportional mit der Größe dieses Volumens anwächst. Man wählt allerdings nur solche Volumen aus, in denen sich die Wellenfunktion nur wenig ändert.

1.3. Wiederholung und Zusammenfassung. Bei der Durchführung von Experimenten mit Teilchenstrahlung - etwa einem Elektronenstrahl - bei denen die einzelnen Teilchen prinzipiell ununterscheidbar sind, beobachtet man Interferenz und Beugungsphänomene. Solche Phänomene kennt man der Wellenstrahlung (Schall, Licht).

Entsprechend bringen wir auch mit der Teilchenstrahlung einen Wellencharakter in Verbindung. Mathematisch beschreiben wir dieses Verhalten der Teilchen durch eine Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$. Sie ist eine Funktion von Ort \mathbf{r} und Zeit t . Die beobachteten Phänomene der Interferenz und Beugung der Teilchen ist nun eine direkte Konsequenz dieser Beschreibung der Teilchen durch eine Wellenfunktion, wenn wir fordern, dass für diese Wellenfunktion wie für die Lösung der MAXWELL-Gleichung das Superpositionsprinzip gilt¹ - da wir ja eben auch für Teilchen konstruktive und destruktive Interferenz auf dem Schirm beobachten. Die Interpretation dieser Wellenfunktion ist die folgende:

**$\psi(\mathbf{r}, t)$ hat die Bedeutung einer Wahrscheinlichkeitsamplitude.
Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \cdot d^3r$ gibt an, wie
wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, ein Teilchen zu einem
Zeitpunkt t am Ort \mathbf{r} in einem Volumenelement dV zu messen.**

Anstelle der von der klassischen Physik her bekannten Größe Intensität einer Welle² - proportional zum Quadrat der Welle - tritt nun die Wahrscheinlichkeitsdichte. Ein freies Teilchen kann daher in physikalisch sinnvoller Weise nicht durch eine einzige ebene Wellenfunktion dargestellt werden, also z.B. durch:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \cdot e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \quad (3)$$

da nämlich dann das Quadrat:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi(\mathbf{r}, t) \cdot \psi^*(\mathbf{r}, t) = |\psi_0|^2 \quad (4)$$

an jedem Punkt konstant³ und von Null verschieden wäre, was aber experimentell unsinnig ist. Kein reales Teilchen hat zu einem Zeitpunkt an jedem Ort des Universums die gleiche Aufenthaltswahrscheinlichkeit⁴. Aus diesem Grund ist es nötig, ein freies Teilchen durch ein Wellenpaket zu beschreiben, wir werden insbesondere die

¹Damit konnten wir ja konstruktive und destruktive Interferenz überhaupt erst beschreiben.

²Auch in der klassischen Physik ist die Intensität - gegeben durch das Quadrat der Wellenfunktion - einer Welle nicht in jedem Fall mit ihrer Energiedichte verknüpft. Für lineare Wellengleichungen ist die Energiedichte durch einen Ausdruck gegeben, der in der Amplitude der Wellenfunktion und / oder ihren Ableitungen bilinear ist, gegeben.

³Die Normierung über den ganzen Raum ergäbe:

$$\int_{x=-\infty}^{\infty} \int_{y=-\infty}^{\infty} \int_{z=-\infty}^{\infty} |\psi(x, y, z, t)|^2 \cdot dx \cdot dy \cdot dz = \infty$$

was unsinniges Ergebnis für ein reales Teilchen ist.

⁴Wir könnten den Ort eines Elektrons durch el. Felder einschränken, es damit in einen endlichen Volumenbereich einsperren.

besonders sinnvollen GAUSS-Wellenpakete in der Quantenmechanik kennenlernen⁵. Was wir nun noch brauchen ist die Gleichung deren Lösungsfunktionen die Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r}, t)$ sind, so wie die MAXWELL-Gleichung die Gleichung war, deren Lösung die elektromagnetischen Wellenfunktionen war, wir werden sie im Folgenden als **SCHRÖDINGER-Gleichung** kennenlernen.

⁵Siehe Skript 1 zur Quantenmechanik.

2. DIE SCHRÖDINGER-GLEICHUNG

2.1. Die Wellenfunktion als Lösung einer Differenzialgleichung. In der klassischen Physik ergeben sich die messbaren Größen (Ort, Impuls) aus den vorausgesetzten Axiomen. Ihr wesentlicher Inhalt ist in Form von Differenzialgleichungen formuliert wie z.B. in der Bewegungsgleichung NEWTONs:

$$m \cdot \ddot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

oder in den MAXWELL-Gleichungen im Vakuum:

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (8)$$

$$\nabla \times \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) - \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \quad (9)$$

die ausführlich besprochen wurden. Die spezielle Form der aus den Axiomen folgenden Differenzialgleichung, aus der die messbaren Größen wie z.B. $\mathbf{r}(t)$ für ein Teilchen oder $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ für ein elektromagnetisches Feld als Lösungen ermittelt werden können, hängen von der jeweiligen konkreten Situation ab. Kraft bzw. potenzielle Energie als Funktion des Ortes und der Zeit, Ladungsdichte und Stromdichte als Funktion von Ort und Zeit.

In speziellen Situationen erhält man in der Physik Wellenphänomene wie etwa Wasserwellen, Schallwellen, Lichtwellen etc., wobei sich die jeweils messbare Momentanauslenkung, die Momentanamplitude, z.B. elektrischer Feldstärkevektor etc. als Lösung einer speziellen Differenzialgleichung, der sogenannten Wellengleichung ergibt. Wir kennen als Beispiel hierfür die MAXWELL-Wellengleichungen im Vakuum:

$$\Delta \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} \quad (10)$$

$$\Delta \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2}$$

die sich direkt aus den obigen MAXWELL-Gleichungen ergeben.

In der Quantenphysik steht als einzige Größe zur Beschreibung des Zustandes eines Teilchens bzw. eines Systems von Teilchen die Wellenfunktion zur Verfügung, also eine Funktion von Ort und Zeit, die charakteristische Züge (z.B. die Superpositionierbarkeit) der Momentanamplitude einer klassischen Welle aufweist. Daher werden wir nun in Analogie annehmen, dass auch **die quantenmechanische Wellenfunktion Lösung einer bestimmten Differenzialgleichung = quantenmechanische Wellengleichung ist**. Im Gegensatz zur klassischen Physik läßt sich diese Gleichung aber nicht aus ihr zugrundeliegenden Axiomen herleiten, die gesuchte Differenzialgleichung hat somit selbst axiomatischen Charakter. Sie nimmt in der Quantenmechanik dieselbe Rolle ein, wie die Bewegungsgleichung NEWTONs in der klassischen Mechanik.

Die der Quantenmechanik zugrundeliegende Wellengleichung, die SCHRÖDINGER-Gleichung, muss als Axiom postuliert werden. Es lassen sich jedoch aufgrund unserer bisherigen Erkenntnisse über Eigenschaften der Wellenfunktion, die sie besitzen muss, um das Verhalten der Mikroobjekte zu beschreiben einige Aussagen über die allgemeine Form dieser Wellengleichung machen:

(A) Aus dem Superpositionsprinzip, das wir für die Wellenfunktion voraussetzen, schließen wir, dass es sich um eine **lineare homogene Differenzialgleichung** handeln muss.

(B) Aus der eindeutigen Beschreibung des Zustands durch eine Wellenfunktion mit der Konsequenz, dass auch die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion (und damit ihres Quadrates) $\psi(\mathbf{r}, t)$ aus einer Momentaufnahme, z. B. $\psi(\mathbf{r}, 0)$ bestimmt ist, können wir schließen, dass die gesuchte Differenzialgleichung von **1. Ordnung in der Zeit** ist.

Bemerkung:

1. Der erste Punkt ist ein allgemeines Ergebnis aus der Mathematik, eine lineare homogene Differenzialgleichung hat das allgemeine Aussehen :

$$\left\{ \begin{array}{l} c_0(x, t) \cdot f(x, t) + c_1(x, t) \cdot \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} + c_2(x, t) \cdot \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} + \dots \\ + c_n(x, t) \cdot \frac{\partial^n f(x, t)}{\partial x^n} + \dots + b_1(x, t) \cdot \frac{\partial f(x, t)}{\partial t} + \dots + b_m(x, t) \cdot \frac{\partial^m f(x, t)}{\partial t^m} = const. \end{array} \right\} \quad (11)$$

für den eindimensionalen Fall, d.h. es kommen keine gemischten Ableitungen wie $\frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x \partial t}$ oder Quadrate wie $\left(\frac{\partial f(x, t)}{\partial x}\right)^2$ vor. Die meisten Differenzialgleichungen sind lineare Differenzialgleichungen, betrachte die folgenden Beispiele :

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) &= m \cdot \frac{d^2 \mathbf{r}(t)}{dt^2}, \text{ NEWTON-Bewegungsgleichung} & (12) \\ \Delta \varphi(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\varepsilon_0}, \text{ Potenzialgleichung} \\ \frac{d^2 \mathbf{x}(t)}{dt^2} + \omega^2 x(t) &= 0, \text{ Schwingungsgleichung} \end{aligned}$$

und noch viele mehr.

2. Die zweite Aussage ist für uns noch überprüfensnotwendig, denn wir hätten die gesuchte Gleichung angesetzt wie die MAXWELL-Gleichung⁶:

$$\frac{\partial^2 \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = const. \cdot \Delta \psi(\mathbf{r}, t) \quad (13)$$

wobei wir die Konstante dann noch bestimmen müssten. Wir hätten damit die zweite Zeitableitung der Wellenfunktion "mit ins Spiel gebracht". Es lässt sich jedoch zeigen,

⁶Da man ja Beugung und Interferenz für das Licht mit ihrer Hilfe beschreiben kann.

dass die Größe der zweiten Zeitableitung in der nichtrelativistischen Näherung vernachlässigt werden kann⁷. Letzten Endes zeigt der Erfolg der SCHRÖDINGER-Gleichung bei der Überprüfung ihrer mathematischen Ergebnisse mit dem Experiment, dass sie so wie sie angesetzt wurde, sinnvoll ist, obwohl sie allerdings auf andere Art und Weise (und mit anderer Interpretation) von SCHRÖDINGER postuliert wurde. Dieser Aspekt wird bei der Betrachtung des H-Atoms noch ausführlicher behandelt.

2.2. Die freie nichtrelativistische SCHRÖDINGER-Gleichung . Aus den genannten Gründen bleibt somit nur noch die Möglichkeit, die gesuchte Wellengleichung der Wahrscheinlichkeitsamplitude $\psi(\mathbf{r}, t)$ folgendermaßen anzusetzen:

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \text{const.} \cdot \Delta \psi(\mathbf{r}, t) \quad (14)$$

Die Konstante könnten wir versuchen im Experiment festzulegen, diese Gleichung ist die von SCHRÖDINGER als Axiom eingeführte Gleichung. Er postuliert für die Konstante den Ansatz:

$$\text{const.} = -\frac{1}{i\hbar} \cdot \frac{\hbar^2}{2m} \quad (15)$$

Damit erhalten wir schließlich für ein ein nicht-relativistisches Teilchen der Masse m , auf das keine Kräfte wirken die **freie SCHRÖDINGER-Gleichung**:

$$\frac{1}{i\hbar} \cdot \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \psi(\mathbf{r}, t) \quad (16)$$

Diese Gleichung, bzw. ihre Verallgemeinerung auf ein Teilchen in einem Potenzial, das also nicht mehr kräftefrei ist, postulierte SCHRÖDINGER 1926. Sie sollte den damaligen Problemen bei der Behandlung des Wasserstoffatoms eine mathematische Grundlage zu geben. Diese Gleichung ist wohl die am häufigsten zitierte Gleichung in der physikalischen Literatur und ihre sehr gute Übereinstimmung mit den empirischen Befunden macht ihre besondere Tragfähigkeit für die Quantenmechanik aus.

Lösung im eindimensionalen Fall:

Im eindimensionalen Fall hat sie die folgende Gestalt:

$$\frac{1}{i\hbar} \cdot \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \quad (17)$$

und man erhält über den folgenden Ansatz:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{i(kx - \omega t)} \\ \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} &= -i\omega \cdot e^{i(kx - \omega t)} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) &= k^2 \cdot e^{i(kx - \omega t)} \end{aligned} \quad (18)$$

nach Einsetzen:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{i\hbar} \cdot i\omega \cdot e^{i(kx - \omega t)} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot k^2 \cdot e^{i(kx - \omega t)} \\ \omega &= \frac{\hbar k^2}{2m} \end{aligned} \quad (19)$$

⁷Genauer begründet wird dies z.B. in Fließbach, T: Quantenmechanik, B.I. Verlag 1991.

Damit folgt als **Elementarlösung der freien SCHRÖDINGER-Gleichung** für ein Teilchen der Masse m :

$$\psi(x, t) = e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} \quad (20)$$

Wir werden diese Lösungen mit Maple noch genauer untersuchen, z.B. werden wir auch hier sehen, dass die Linearkombination von solchen Elementarwellen:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\left(k_n x - \frac{\hbar k_n^2}{2m}t\right)} \quad (21)$$

wieder eine Lösung darstellt. Denn die obige einzelne Elementarlösung ist unzureichend zur Beschreibung z. B. eines Elektrons. Man erhält nämlich für die Wahrscheinlichkeitsdichte in diesem Fall:

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \psi(x, t) \cdot \psi^*(x, t) \\ &= e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} \cdot e^{-i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (22)$$

was physikalisch ein unsinniges Ergebnis darstellt.

Mit Maple läßt sich aber auch zeigen, dass z.B. die folgende Überlagerung - ein sogenanntes **FOURIER-Integral** - eine Lösung der freien SCHRÖDINGER-Gleichung darstellt:

$$\psi(x, t) = \int_{k=-\infty}^{\infty} f(k) e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk \quad (23)$$

Mittels dieser Überlagerung lassen sich dann Wellenpakete durch die beliebige Wahl der Funktion $f(k)$ konstruieren, die ausgezeichnet geeignet sind, das Verhalten von Elektronen beschreiben⁸.

2.3. Allgemeine SCHRÖDINGER-Gleichung für die Bewegung in einem Potenzial. Im Falle dass sich das nicht-relativistische Teilchen unter dem Einfluss eines äußeren Potenzial befindet, z. B. das Elektron im H-Atom unter dem Einfluss des Coulomb-Potenzials des Protons, wirken also äußere Kräfte auf das Teilchen, so lautet die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$\frac{1}{i\hbar} \cdot \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \cdot \psi(\mathbf{r}, t) \quad (24)$$

wobei $V(\mathbf{r}, t)$ das äußere Potenzial darstellt.

⁸Siehe Vorlesung 1 zur Quantenmechanik.