

Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 1

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. Es wird noch einmal der Weg zur SCHRÖDINGER-Gleichung beschrieben, der in der Vorlesung "Einführung in die Quantenphysik" begangen wurde. Anschließend wird die allgemeine Lösung der freien SCHRÖDINGER-Gleichung vorgestellt und untersucht.

1. RÜCKBLICK AUF DIE VORLESUNG "EINFÜHRUNG IN DIE QUANTENPHYSIK"

Rückblickend soll zum Einstieg in die Untersuchung der Eigenschaften der SCHRÖDINGER-Gleichung, die die Grundlage dieser Vorlesung ist, nun noch einmal der Weg rekapituliert werden, der in der Vorlesung "Einführung in die Quantenphysik" beschritten wurde. Dabei musste man erkennen, dass die SCHRÖDINGER-Gleichung axiomatischen Charakter besitzt, das heisst nicht logisch aus Grundprinzipien abgeleitet werden kann. Man kann in Vorlesungen über Quantenphysik auch darauf verzichten, sie plausibel zu machen und dahingehend argumentieren, dass ihre Ergebnisse sehr gut zur experimentellen Erfahrung passen.

Wir haben den folgenden Weg beschritten: aus den MAXWELL-Gleichungen und ihrer experimentellen Bestätigung konnten wir den Wellencharakter des Lichts erschließen. Licht zeigt Beugungsfiguren und diese Erscheinung lässt sich über das HUYGENS-Prinzip bzw. seinen Verbesserungen gut beschreiben. Das HUYGENS-Prinzip wiederum lässt sich mit den MAXWELL-Gleichungen unter bestimmten Bedingungen, die aber die experimentellen Ergebnisse nicht verfälschen, vereinbaren und so war klar, dass bis Anfang des 20. Jahrhunderts Licht als eine Welle angesehen wurde, die durch das wellentragende Medium, den Äther, übertragen wurde. EINSTEIN brach radikal mit der Äthertheorie und er war es auch, der Licht Teilcheneigenschaften zuschrieb, um den Photoeffekt zu erklären. Später konnte mit dieser Photonenvorstellung, das heißt Licht der Frequenz ν sollte aus irgendwie gearteten Teilchen der Energie $h\nu$ bestehen, die den Impuls

$$p = \frac{h\nu}{c} \quad (1)$$

tragen der COMPTON-Effekt erklärt werden. Ihre Ruhmasse wäre gleich Null und sie sollten sich mit Lichtgeschwindigkeit in die Richtung des Ausbreitungsvektors der Welle bewegen.

Im Rahmen dieser Vorstellung werden wir uns noch näher mit dieser Photonenvorstellung beschäftigen, um doch noch etwas Licht in das Dunkle der Beschreibung des Lichts zu bringen.

DE BROGLIE postulierte dann Anfang der zwanziger Jahre des 20. Jahrhunderts, dass wenn Licht, das eindeutig Welleneigenschaften aufwies nun auch Teilcheneigenschaften besäße, umgekehrt aus reinen Symmetriegründen nun auch Teilchen wie

Elektronen und Atome Welleneigenschaften besitzen sollten. Er ordnete rein formal einem Teilchen, das den Impuls p besitzt, die Wellenlänge:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{2\pi}{\omega} \quad (2)$$

zu. Dabei war überhaupt noch nicht klar, ob dahinter physikalische Realität steckt, oder wenn ja, was diese Formel bedeuten soll. Nun, sie wurde experimentell bestätigt und führte zu einer grundlegenden neuen Betrachtung der Welt, die wir im Rahmen dieser Vorlesung untersuchen werden.

Um die experimentell eindeutig feststellbaren Welleneigenschaften, z.B. von Elektronen und anderer Teilchen theoretisch erfassen zu können, sah man sich gezwungen eine neue Bewegungsgleichung zu finden, die ähnlich wie die Bewegungsgleichung NEWTONs in der Lage war, Aussagen über den Zustand eines Teilchens oder eines Teilchensystems zu machen. Unter dem Zustand eines Teilchens versteht man dabei eine Aussage über seine Energie, seinen Impuls, seine Geschwindigkeit etc. Dies war in der klassischen Physik kein Problem, man stellte durch eine Messung den Impuls und den Ort eines Teilchens fest. Dann konnte man bei bekannten Kräften auf dieses Teilchen seine zukünftige Bahn berechnen, auf der es sich bewegen würde¹. Das seltsame wellenartige Verhalten von bisher als klassische Teilchen beschriebener physikalischer Gebilde führte durch BORN zu einer statistischen Interpretation des Verhaltens von Elektronen und anderer atomarer Bausteine. Die gesuchte Gleichung sollte Grundlage dieser statistischen Betrachtungsweise sein und atomare Teilchen beschreiben können. Da diese experimentell bestätigte Welleneigenschaften besitzen, muss es eine Wellengleichung sein. Diese wurde von SCHRÖDINGER 1926 bei der mathematischen Beschreibung des H-Atoms mitgeteilt, sie wurde von ihm selbst allerdings noch ganz anders beurteilt. Sie hat die folgende Gestalt für ein Teilchen, auf das keine äußeren Kräfte wirken:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) \quad (3)$$

Dabei ist i die imaginäre Einheit, m die Masse des Teilchens und die $\hbar = \frac{h}{2\pi} \sim 1.054 \cdot 10^{-34} Js$, das PLANCK-Wirkungsquantum. Δ ist der bekannte LAPLACE-Operator, der auch in den MAXWELL-Gleichungen auftritt. In kartesischen Koordinaten hat er die folgende Darstellung:

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (4)$$

Die SCHRÖDINGER-Gleichung wird folgendermaßen interpretiert: $\psi(\mathbf{r}, t)$ ist die sogenannte "Zustands- oder Wellenfunktion" oder "Wellenamplitude". Ihr Betragsquadrat $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, das Teilchen am Ort \mathbf{r} bzw. in einem winzigen Volumen an diesem Ort zum Zeitpunkt t zu messen.

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation erfordert die Normierbarkeit des Betragsquadrates:

$$\iiint_{V=R^3} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (5)$$

¹Natürlich muss man dabei immer Reibungskräfte berücksichtigen.

2. LÖSUNG DER FREIEN SCHRÖDINGER-GLEICHUNG IM EINDIMENSIONALEN FALL

Maple-Datei zur Vorlesung :

- QMVorl1Pr1.mws

In diesem Fall reduziert sich der LAPLACE-Operator auf die zweite Ortsableitung und die freie SCHRÖDINGER-Gleichung hat die Gestalt:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \quad (6)$$

Wir haben die Lösung bereits in der 19. Vorlesung der Vorlesung "Einführung in die Quantenphysik" kennengelernt, sie lautet:

$$\psi(x, t) = e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)} \quad (7)$$

Dabei bezeichnet k den Wellenvektor der Wahrscheinlichkeitswelle, er hängt mit der Frequenz ω über

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (8)$$

zusammen. Man erhält hieraus für den Impuls des Teilchens:

$$p = \hbar \omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (9)$$

Beachte, dass man für die SCHRÖDINGER-Gleichung nicht die Beziehung

$$\omega = ck \quad (10)$$

erhält, wie sie in den MAXWELL-Gleichungen aufgetreten war.

Man nennt solche Beziehungen **Dispersionsrelationen** und ihre Bedeutung für die SCHRÖDINGER-Gleichung werden wir noch genauer untersuchen.

Die obige Lösung ist allerdings nicht brauchbar, um ein Elektron oder ein anderes Teilchen zu beschreiben, denn für ihr Quadrat erhält man:

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \psi(x, t) \cdot \psi^*(x, t) \\ &= e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)} \cdot e^{-i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t\right)} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (11)$$

Dieses Ergebnis ist würde bedeuten, dass das Betragsquadrat nicht normierbar ist für jeden Ort² die Wahrscheinlichkeit das Elektron zu messen (und zwar zu jeweils dem gleichen Zeitpunkt!!) gleich Eins ist. Das Elektron wird aber im Experiment immer nur als ganzes gemessen und zwar an einem Ort. Mit anderen Worten, diese obige Elementarlösung ist unsinnig bzw. ergänzungsbedürftig.

Im zugehörigen Programm "QMVorl1.mws" wird die obige Elementarlösung noch einmal hergeleitet. Wir kennen diesen Lösungstyp bereits, der Realteil beschreibt eine

²Bzw. in einem winzigen Volumen am Ort. Diese Ergänzung verfälscht nicht das Ergebnis der Unbrauchbarkeit der oben berechneten Lösung.

ebene Welle. Wir haben die SCHRÖDINGER-Gleichung auch als Wellengleichung kennengelernt und wissen daher, dass die Summe zweier Elementarlösungen:

$$\begin{aligned}\psi_1(x, t) &= e^{i\left(k_1 x - \frac{\hbar k_1^2}{2m} t\right)} \\ \psi_2(x, t) &= e^{i\left(k_2 x - \frac{\hbar k_2^2}{2m} t\right)}\end{aligned}\quad (12)$$

wieder eine Lösung darstellt. Sie lassen sich konstruktiv und destruktiv überlagern, wir kennen dies bereits aus der MAXWELL-Theorie. Man kann sogar zeigen, dass eine unendliche Summe von Elementarlösungen:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\left(k_n x - \frac{\hbar k_n^2}{2m} t\right)} \quad (13)$$

wieder eine Lösung darstellt. Wir haben bereits die mehrfache Addition von Elementarwellen als sogenanntes "Wellenpaket" kennengelernt.

Mit Hilfe dieser Wellenpakete ist es zumindest möglich, räumlich abgegrenzte Gebilde zu konstruieren³:

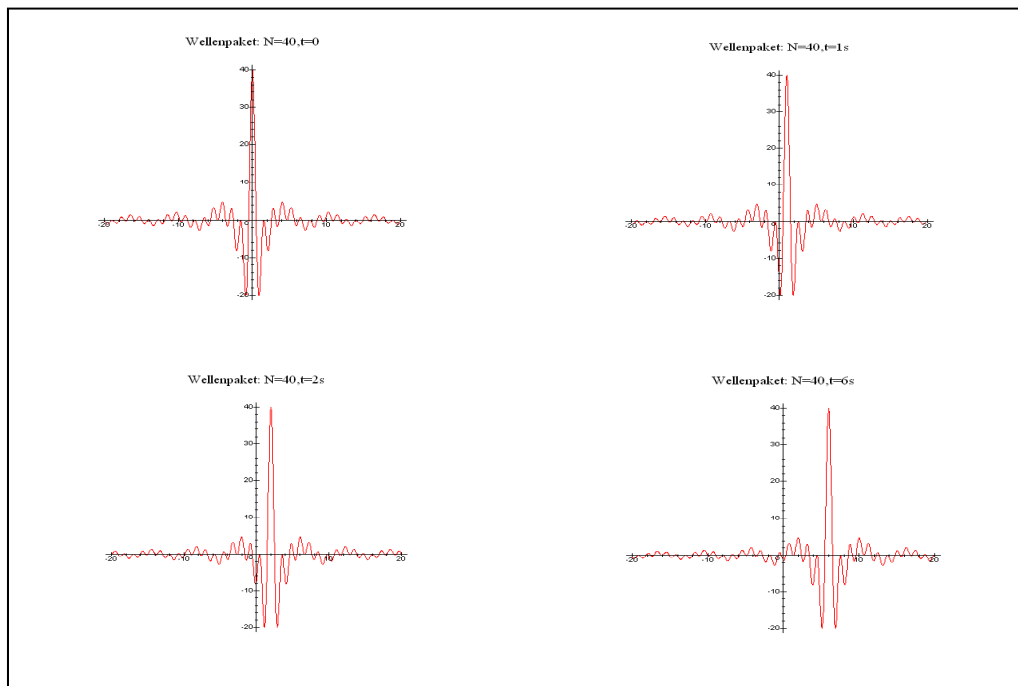


Figure 1: Zeitliche Überlagerung von 40 Elementarwellen - siehe Skript 14 zur Einführung in die Quantenphysik.

Man kann in diesem Bild erkennen, dass die Funktion und damit das wesentliche

³Siehe die Skripten zur 6. und 15. Vorlesung zur Einführung in die Quantenphysik.

physikalische Geschehen, wenn wir es durch solch ein Wellenpaket beschreiben wollten, in einem zentrierten Bereich stattfindet. Dies ist z. B. für die Nachweiswahrscheinlichkeit eines Elektrons der Fall, denn an einem Punkt⁴ wird es ja gemessen. Mit anderen Worten die Nachweiswahrscheinlichkeit ist für einen Punkt am höchsten, also zentriert. Wir werden in Form der GAUSS-Wellenpakete in Kürze als weitaus geeignetere Wellenpakete kennenlernen.

⁴Genauer gesagt in einem Volumen um diesen Punkt herum!

3. EIN FOURIER-INTEGRAL ALS LÖSUNG DER FREIEN SCHRÖDINGER-GLEICHUNG

Maple-Datei zu diesem Abschnitt :

- QMVorl1Pr3.mws

In diesem Programm zeigt Maple das auch die folgende Funktion eine Lösung der freien eindimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung ist:

$$\psi(x, t) = \int_{k=-\infty}^{\infty} a(k) \cdot e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}\right)} dk \quad (14)$$

Dies kann man nachprüfen, in dem man diese Funktion in der freie SCHRÖDINGER-Gleichung einsetzt, was aber im Programm von Maple erledigt wird. Der große Vorteil dieser Lösung ist, dass die Funktion $a(k)$ frei wählbar ist und das werden wir uns nun zu nutze machen, um GAUSS-Wellenpakete zu konstruieren. In der Tat kann man zeigen, dass diese Funktion auch die allgemeine Lösung der freien SCHRÖDINGER-Gleichung ist.

3.1. Die GAUSS-Funktion. Wir betrachten nun eine besondere Wahl der Funktion $a(k)$, nämlich der folgenden Art :

$$a(k) = C \cdot e^{\frac{-(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} \quad (15)$$

wobei im Programm "QMVorl1Pr3.mws" der Einfluss der Konstanten untersucht wird. Als Ergebnis der Betrachtung verschiedener Graphen erhält man:

$$\begin{array}{ll} C & : \text{Höhe der Funktion} \\ k_0 & : \text{Zentrum der Funktion} \\ \sigma_k & : \text{Breite der Funktion} \end{array} \quad (16)$$

Der Sinn dieser besonderen Funktionenwahl wird im Verlauf der folgenden Betrachtungen noch klarer werden. Wir suchen allerdings eine Funktion, die es ermöglicht die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthalt z.B. eines Elektrons sinnvoll zu beschreiben. Das diese Forderung durch die GAUSS-Funktion erfüllt wird, werden die folgenden Überlegungen zeigen. Wir wissen aus den Ergebnissen der Beugungsbilder von Elektronen⁵ bereits, gibt es Orte auf dem Beugungsschirm, die wahrscheinlicher sind als andere Orte. Die gesuchte Funktion muss also in irgendeiner Weise eine Zentrierung, mit anderen Worten ein ausgeprägtes Maximum aufweisen. Dies leistet die GAUSS-Funktion, deren Graphen wir nun in verschiedenen Darstellungen betrachten wollen.

⁵Siehe Skript 18 zur Vorlesung Einführung in die Quantenphysik.

Betrachte dazu die folgende Abbildung:

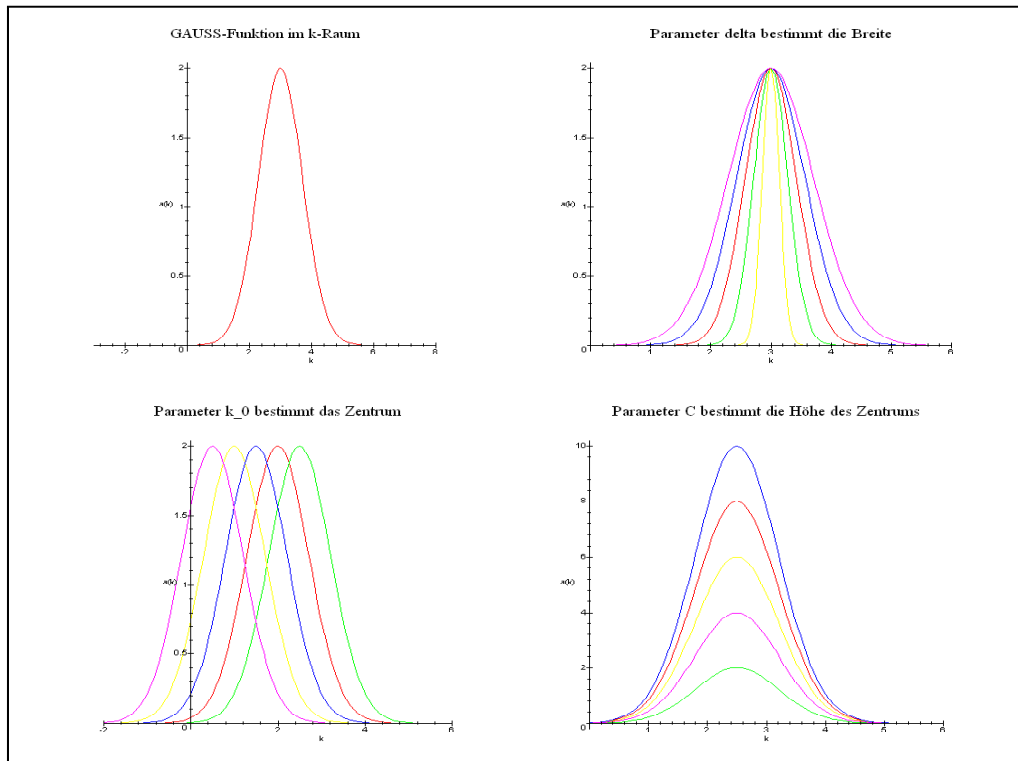


Figure 2: Einfluss der verschiedenen Parameter auf die GAUSS-Funktion.

Man kann erkennen:

1. Je größer σ_k gewählt wird, umso breiter wird die Funktion.
2. Der Parameter k_0 beschreibt das Zentrum der Funktion.
3. Der Parameter C gibt die Höhe der Funktion im Zentrum an.

Dabei ist es im allgemeinen üblich, die Parameter σ_k und k_0 nichtnegativ zu wählen. Setzen wir nun unsere Wahl der Funktion $a(k)$ in die allgemeine Lösung der freien eindimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung ein. Wir erhalten dann:

$$\psi(x, t) = \int_{k=-\infty}^{\infty} C \cdot e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} \cdot e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk \quad (17)$$

Dieses Integral ist ein GAUSS-Wellenpaket und die Berechnung ist prinzipiell nicht schwer, doch man muss einige „Kniffe“ anwenden, damit Maple es berechnen kann. Diese Tricks werden alle im Programm gezeigt, aber sie sollen hier wiederholt werden, da solche Integrale des öfteren auftauchen werden. Die Berechnung ist nicht wirklich

kompliziert, hat man das Prinzip erst einmal verstanden. Das Ziel der Umformung des Integranden ist ein Integral der Art:

$$\int_{k=-\infty}^{\infty} e^{-A \cdot k^2} dk = \sqrt{\frac{\pi}{A}} \quad (18)$$

wobei $A > 0$ gelten muss. Im Prinzip läuft die Umformung auf eine quadratische Ergänzung hinaus, die im folgenden beschrieben werden soll:

$$\int_{k=-\infty}^{\infty} C \cdot e^{\frac{-(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2}} \cdot e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk = C \cdot \int_{k=-\infty}^{\infty} e^{\frac{-(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2} + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk \quad (19)$$

Betrachten wir den Integranden näher:

$$e^{\frac{-(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2} + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} \quad (20)$$

und hier interessiert nun der Exponent:

$$\frac{-(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2} + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right) \quad (21)$$

Wir formen ihn folgendermaßen um:

$$\begin{aligned} \frac{-(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2} + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right) &= -\frac{1}{4\sigma_k^2} (k^2 - 2kk_0 + k_0^2) + ikx - k^2 \frac{i\hbar}{2m}t \\ &= -k^2 \left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t \right) + k \left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix \right) - \frac{1}{4\sigma_k^2} k_0^2 \\ &= -k^2 \left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t \right) + k \left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix \right) - \frac{1}{4\sigma_k^2} k_0^2 + \\ &\quad \text{(quadratische Ergänzung!)} + \left(\frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix \right)}{2 \cdot \sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t \right)}} \right)^2 - \left(\frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix \right)}{2 \cdot \sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t \right)}} \right)^2 \\ &= - \left(k \sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t \right)} - \frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix \right)}{2 \cdot \sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t \right)}} \right)^2 + \\ &\quad + \left(\frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix \right)}{2 \cdot \sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t \right)}} \right)^2 - \frac{1}{4\sigma_k^2} k_0^2 \end{aligned}$$

Das bedeutet, unser Integrand hat nun die folgende Gestalt:

$$e^{\frac{-(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2} + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} = e^{-\left(k\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)} - \frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix\right)}{2\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}}\right)^2} \cdot e^{-\frac{1}{4\sigma_k^2}k_0^2} \quad (22)$$

Damit erhalten wir dann:

$$C \cdot \int_{k=-\infty}^{\infty} e^{\frac{-(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2} + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk = C \cdot e^{-\left(\frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix\right)}{2\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}} - \frac{1}{4\sigma_k^2}k_0^2\right)^2} \cdot \int_{k=-\infty}^{\infty} e^{-\left(k\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)} - \frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix\right)}{2\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}}\right)^2} dk \quad (23)$$

Nun substituieren wir:

$$z = k\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)} - \frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix\right)}{2\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}} \quad (24)$$

$$\frac{dz}{dk} = \sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}$$

$$dk = \frac{dz}{\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}}$$

und damit:

$$\begin{aligned} \int_{k=-\infty}^{\infty} e^{-\left(k\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)} - \frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix\right)}{2\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}}\right)^2} dk &= \int_{z=-\infty}^{\infty} e^{-z^2} \frac{dz}{\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}} \quad (25) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}} \cdot \int_{z=-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}} \cdot \sqrt{\pi}$$

Wir erhalten:

$$\int_{k=-\infty}^{\infty} e^{-\left(k\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)} - \frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix\right)}{2\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}}\right)^2} dk = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}} \quad (26)$$

und damit endgültig:

$$\psi(x, t) = C \cdot \int_{k=-\infty}^{\infty} e^{\frac{-(k-k_0)^2}{4\sigma_k^2} + i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk = C \frac{\sqrt{\pi} \cdot e^{\left(\frac{\left(\frac{k_0}{2\sigma_k^2} + ix\right)}{2\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}}\right)^2 - \frac{1}{4\sigma_k^2}k_0^2}}{\sqrt{\left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}} \quad (27)$$

Obwohl dieses Ergebnis recht lang ist, handelt es sich nur um eine quadratische Ergänzung, die schon aus der Schule bekannt ist. Eine Zerlegung der Wellenfunktion in Amplitude und Phase führt zu:

$$\psi(x, t) = M(x, t) \cdot e^{i\Phi(x, t)} \quad (28)$$

$$M(x, t) = \frac{C \cdot \sqrt{2\pi} \cdot \sqrt{\sigma_k}}{\sqrt{\sigma_x(t)}} \cdot e^{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{4\sigma_x^2(t)}} \quad (29)$$

$$\Phi(x, t) = \frac{m(2mk_0x - \hbar k_0^2t - 4\sigma_k^4x^2t)}{2m^2 + 8\sigma_k^4\hbar^2t^2} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{2\sigma_k^2\hbar t}{m}\right) \quad (30)$$

$$\sigma_x(t) = \sqrt{\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{\hbar^2\sigma_k^2}{m^2}t^2} \quad (31)$$

Die Konstante C kann nun verwendet werden, um die Normierungsbedingung:

$$\int_{x=-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (32)$$

zu erfüllen. Man erhält damit:

$$\int_{x=-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \frac{C^2 \cdot 2\pi \cdot \sigma_k}{\sigma_x(t)} \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2\left(x - \frac{\hbar k_0}{m}t\right)^2}{4\sigma_x^2(t)}} dx = \frac{C^2 \cdot 2\pi \cdot \sigma_k}{\sigma_x(t)} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{2\sigma_x^2(t)}}} =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{C^2 \cdot 2\pi \cdot \sigma_k}{\sigma_x(t)} \cdot \sigma_x(t) \sqrt{2\pi} = C^2 2\pi \cdot \sqrt{2\pi} \sigma_k = 1 (!) \\
 \Rightarrow C &= \sqrt{\frac{1}{2\pi \cdot \sqrt{2\pi} \sigma_k}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot (2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_k}}
 \end{aligned} \tag{33}$$

Das folgende Diagramm⁶ zeigt die Entwicklung des Absolutquadrates für die Wahl $\sigma_k = 1.5 \text{ m}^{-1}$:

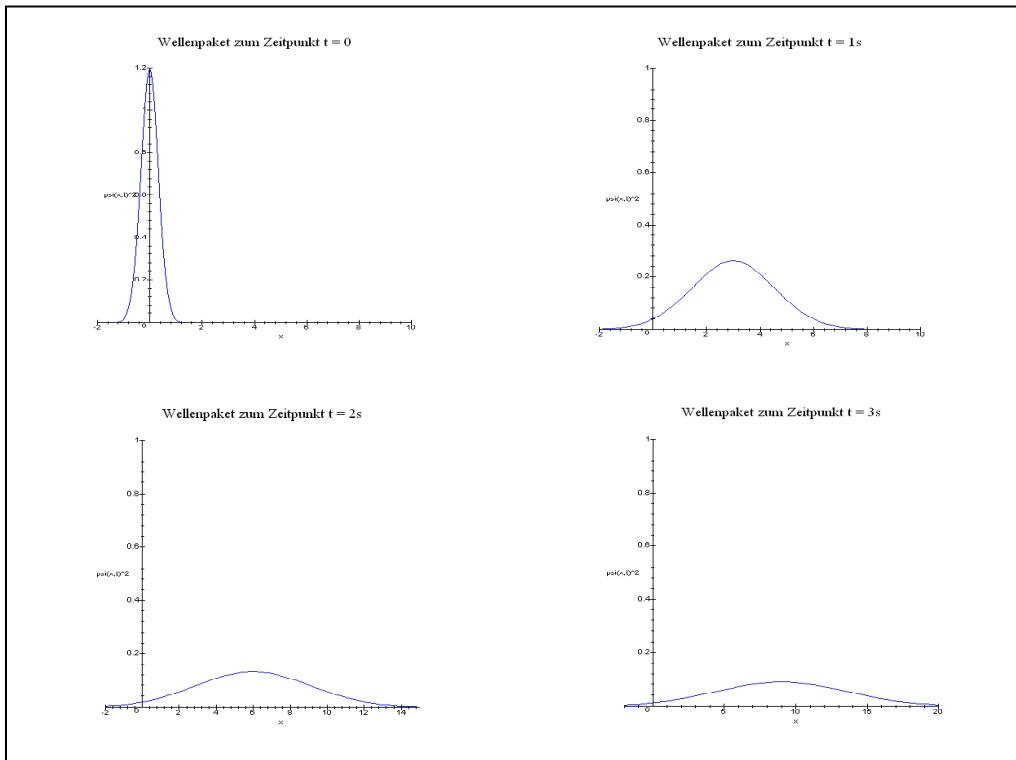


Figure 3: Entwicklung von $|\psi(x, t)|^2$ für die Wahl $\sigma_k = 1.5 \text{ m}^{-1}$. Die Einheit der horizontalen Achse ist Meter. Die Einheit der vertikalen Achse ist m^{-1} , da sie die Wahrscheinlichkeit pro Längeneinheit angibt.

In der Darstellung wurde aus Gründen der vereinfachten Darstellung mit Maple $\hbar = m = 1$ gesetzt!

Betrachtet man dieses Diagramm - und die Animation im Programm - so erkennt man dass die Wahrscheinlichkeit des Teilchensnachweis zum Zeitpunkt $t = 0$ in einem relativ kleinen Intervall um $x = 0$ sehr hoch ist. Mit zunehmender Dauer verliert man Information über den wahrscheinlichsten Ort des kräftefreien Teilchens. Die Kurve

⁶Im Programm QMVor1Pr3.mws kann man die Konstanten beliebig wählen. Eine Maple-Fehlermeldung der Art: *Plotting error, Maple float too small to represent as a hardware float* kann durch eine Änderung der Intervallgrenzen innerhalb des jeweiligen plot-Befehls behoben werden. Daneben zeigt das Programm eine Animation des zeitlichen Verlaufs der Wahrscheinlichkeitsdichte. Für die Animation sind ebenfalls die Konstanten frei vom Benutzer wählbar.

der Wahrscheinlichkeitsdichte wird immer breiter, damit wird es immer schwieriger das Teilchen mit hoher Wahrscheinlichkeit an einem Ort zu lokalisieren. Es lässt sich somit immer schwieriger vorhersagen, wo denn das Teilchen zu einem späteren Zeitpunkt sich aufhält.

Betrachten wir nun zum Vergleich eine schmalere Verteilung im k-Raum, nämlich $\sigma_k = 0.5 \text{m}^{-1}$:

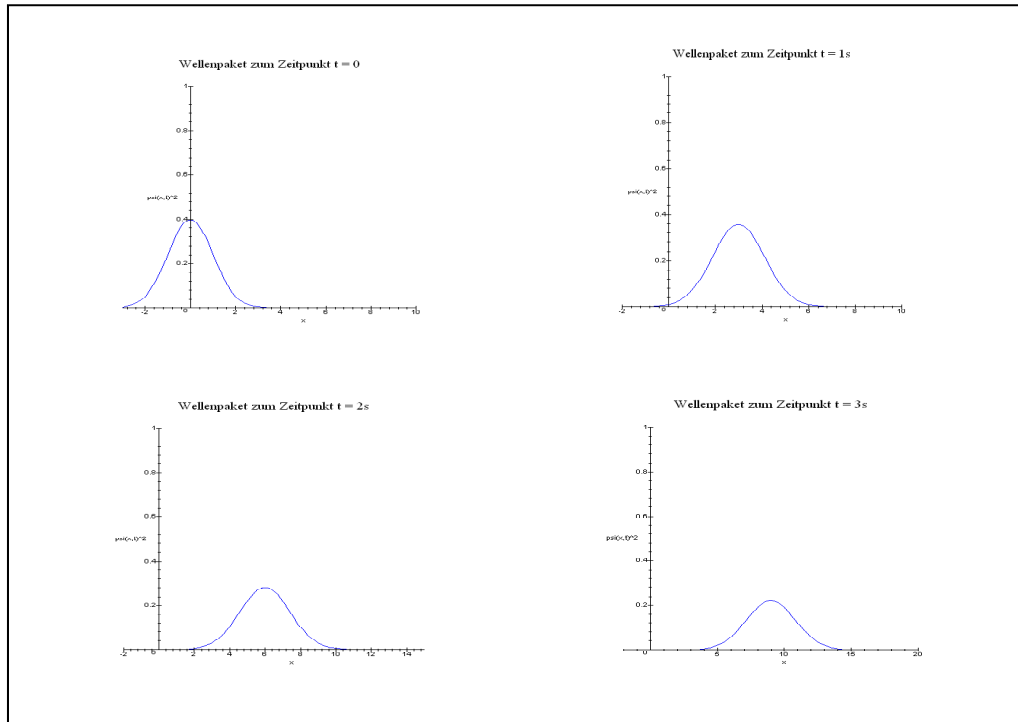


Figure 4: Wahrscheinlichkeitsdichte für den Fall $\sigma_k = 0.5 \text{m}^{-1}$. Die Achseneinheiten sind identisch mit denen aus der vorherigen Darstellung.

Es fällt auf, dass wenn man die Verteilung der k-Werte - die natürlich über $p = \hbar k$ den Impulswerten des Teilchens entsprechen - durch einen kleineren σ_k -Wert schmaler wählt, d.h. man also eine höhere Kenntnis über den Impuls des freien Teilchens hat, man von Anfang an, Information über den wahrscheinlichsten Ort des Teilchens verliert. Die Verteilung der x-Werte ist auch zum Zeitpunkt $t = 0$ breiter und zerfließt auch mit zunehmender Dauer schneller als im Falle eines größeren σ_k -Wertes! Man kann also die folgende Vermutung haben: *Je genauer die Information über den Impuls des Teilchens ist, desto ungenauer ist die Information über den Ort des Teilchens und umgekehrt!*

Diese Vermutung lässt sich auch mathematisch belegen, betrachte dazu die folgende Entwicklung:

$$\sigma_p = \hbar \cdot \sigma_k$$

$$\begin{aligned}\sigma_x(t) &= \sqrt{\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{\hbar^2 \sigma_k^2}{m^2} t^2} \\ \sigma_p^2 \cdot \sigma_x^2(t) &= \hbar^2 \cdot \sigma_k^2 \cdot \left(\frac{1}{4\sigma_k^2} + \frac{\hbar^2 \sigma_k^2}{m^2} t^2 \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} + \frac{\hbar^4 \sigma_k^4}{m^2} t^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}\end{aligned}$$

Hieraus folgt dann sofort:

$$\sigma_p \cdot \sigma_x(t) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (34)$$

eine Abschätzung die als **HEISENBERG'sche Unbestimmtheitsrelation** bekannt ist! Man kann erkennen, dass das Produkt der beiden Unbestimmtheiten oder Unschärfen σ_p und $\sigma_x(t)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ den kleinsten Wert $\frac{\hbar}{2}$ besitzt und dann mit zunehmendem t wächst. Diese Abschätzung, die zuerst von HEISENBERG formuliert wurde, ist eine der wichtigsten Ergebnisse der Quantentheorie und war und ist in ihrer Interpretation umstritten. Auf die unterschiedlichen Auffassungen zur HEISENBERG'schen Unbestimmtheitsrelation soll an dieser Stelle noch nicht eingegangen werden. Die Frage nach ihrem Verständnis wird aber in einer späteren Vorlesung wieder aufgegriffen und die verschiedenen Meinungen werden dann vorgestellt. Die folgende Graphik stellt die mathematische Aussage der Unbestimmtheitsrelation noch einmal in einem Bild dar:

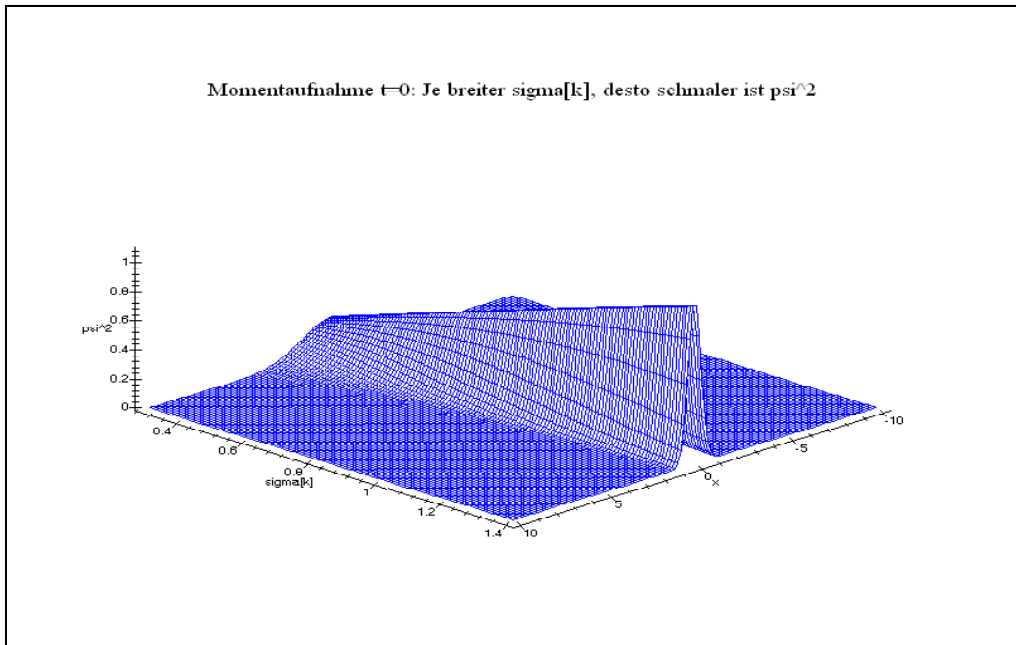


Figure 5: Darstellung von $|\psi(x,0)|^2$ in Abhängigkeit von σ_k . Die Einheiten der Achsen ist m, m^{-1} sowie der Wahrscheinlichkeitsdichte pro m in der vertikalen Achse.