

Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 2

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. Es wird nun die zweidimensionale SCHRÖDINGER-Gleichung und ihre allgemeine Lösung näher untersucht. Insbesondere werden zweidimensionale GAUSS-Wellenpakete vorgestellt.

1. DIE ZWEIDIMENSIONALE FREIE SCHRÖDINGERGLEICHUNG

Maple-Dateien zur Vorlesung:

- QMVorl2Pr1.mws (Diskussion der GAUSS-Funktion und des zugehörigen Wellenpakets)
- OMVorl2Pr2.mws (Lösung der zweidimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung durch einen Separationsansatz, Diskussion der Lösungen)
- OMVorl2Pr3.mws (Zur SCHRÖDINGER-Gleichung: allgemeine Separation im Falle eines äußeren Potentials)

Wir betrachten nun in dieser Vorlesung die zweidimensionale freie SCHRÖDINGER-Gleichung. Anhand von GAUSS-Wellenpaketen lässt sich dann das Entstehen und Vergehen von Information, die sogenannte **Quantenmechanische Dispersion**, studieren. Beginnen wir also mit ihrer zweidimensionalen Form:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, t)}{\partial y^2} \right) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial t} \quad (1)$$

die sich ja direkt aus der Gestalt des LAPLACE-Operators ergibt. Wir versuchen nun den gleichen Ansatz einer Lösung wie bei der MAXWELL-Gleichung¹:

$$\psi(x, y, t) = e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)} \quad (2)$$

Setzen wir sie ein, so erhalten wir:

$$\frac{\partial^2 \psi(x, y, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)} \quad (3)$$

$$= (-1) \cdot k_1^2 \cdot e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)}$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x, y, t)}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial y^2} e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)}$$

$$= (-1) \cdot k_2^2 \cdot e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)}$$

$$\frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)} \quad (4)$$

$$= -i \cdot \omega \cdot e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)} \quad (5)$$

¹Siehe Skript 4 zur Vorlesung *Einführung in die Quantenphysik*.

einsetzen ergibt dann:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (-1) \cdot e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)} \cdot (k_1^2 + k_2^2) &= i\hbar \cdot (-i) \cdot \omega \cdot e^{i(k_1 x + k_2 y - \omega t)} \quad (6) \\ \frac{\hbar^2}{2m} \cdot (k_1^2 + k_2^2) &= \hbar \cdot \omega \\ \omega &= \frac{\hbar}{2m} \cdot (k_1^2 + k_2^2) \end{aligned}$$

und natürlich ist dies das entsprechende Analogon zur Dispersionsrelation:

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

der eindimensionalen freien SCHRÖDINGER-Gleichung. Eine komplette Lösung der freien SCHRÖDINGER-Gleichung durch einen Separationsansatz findet man im Programm

"QMVorl2Pr2.mws". Auch im zweidimensionalen Fall kann man als allgemeine Lösung wieder ein FOURIER-Integral angeben. Betrachten wir zuerst noch einmal das FOURIER-Integral² im eindimensionalen Fall:

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

Völlig analog dazu erhält man im zweidimensionalen Fall:

$$\psi(x, y, t) = \int_{k_1=-\infty}^{\infty} \int_{k_2=-\infty}^{\infty} a(k_1, k_2) \cdot e^{i\left(k_1 x + k_2 y - \frac{\hbar^2(k_1^2 + k_2^2)}{2m}t\right)} dk_1 dk_2 \quad (8)$$

Natürlich werden wir nun die Funktion $a(k_1, k_2)$ als zweidimensionale GAUSS-Funktion wählen.

2. DIE ZWEIDIMENSIONALE GAUSS-FUNKTION

Im Programm QMVorl2Pr1.mws ist die Struktur der zweidimensionalen GAUSS-Funktion angegeben mit:

$$a(k_1, k_2) = C \cdot e^{-\frac{(k_1 - k_{10})^2}{4\sigma_{k_1}^2}} \cdot e^{-\frac{(k_2 - k_{20})^2}{4\sigma_{k_2}^2}} \quad (9)$$

Man kann dort Beispiele sehen und selbst eingeben.

Die Variablen haben dieselbe Bedeutung wie im eindimensionalen Fall:

$$\begin{aligned} k_{10}, k_{20} &: \text{Koordinaten des Zentrums} \\ \sigma_{k_1}, \sigma_{k_2} &: \text{Breite der Kurve (sind positive Größen), je größer,} \\ &\text{um so breiter ist die Funktion} \end{aligned} \quad (10)$$

²Siehe Skript zur ersten Vorlesung über *Quantenmechanik*, Gleichung (12).

Die folgende Darstellung zeigt zwei Beispiele für eine zweidimensionale GAUSS-Funktion, wobei im ersten Fall die Werte

$$C = 10 \text{ sowie } k_{10}, k_{20} = 0 \text{ und } \sigma_{k_1} = \sigma_{k_2} = 1 \frac{1}{m}$$

und im zweiten Fall:

$$C = 10 \text{ sowie } k_{10} = 3 \frac{1}{m}, k_{20} = 5 \frac{1}{m} \text{ und } \sigma_{k_1} = 1 \frac{1}{m}, \sigma_{k_2} = 1.5 \frac{1}{m}$$

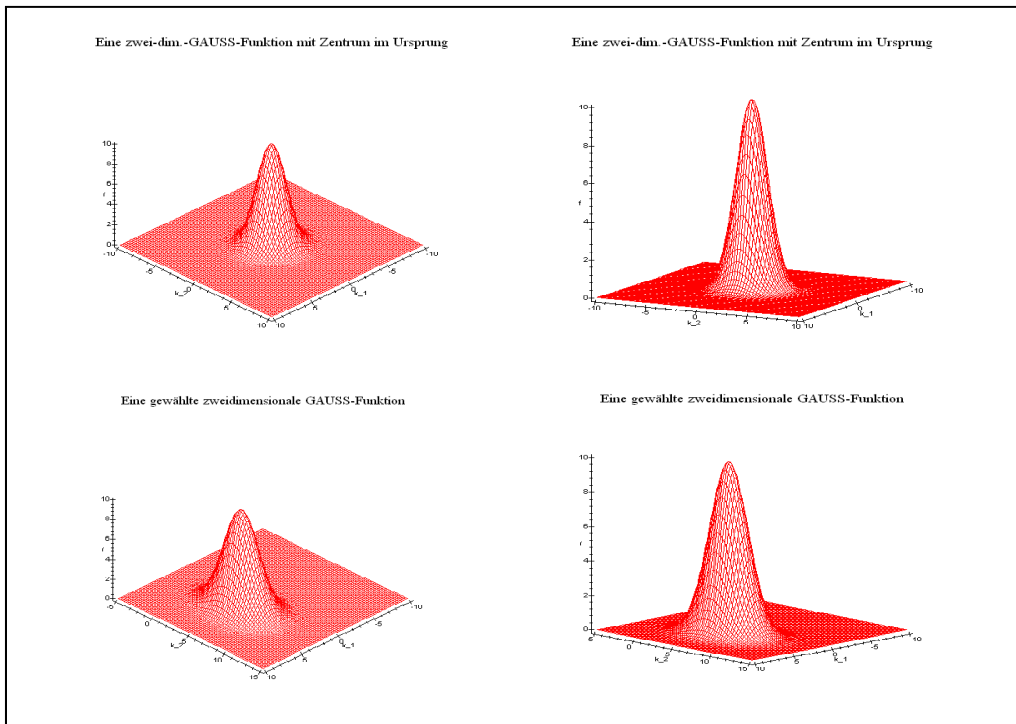


Figure 1: Beispiele für zweidimensionale GAUSS-Funktionen. Die beiden oberen Abbildungen zeigen die Funktion im ersten gewählten Fall.

In beiden Fällen sollte man sich durch die Perspektive nicht täuschen lassen, die maximale Höhe der Funktion ist natürlich Eins.

Wir setzen also diese GAUSS-Funktion analog zum eindimensionalen Fall in die allgemeine Lösung ein und erhalten:

$$\psi(x, y, t) = \int_{k_1=-\infty}^{\infty} \int_{k_2=-\infty}^{\infty} C \cdot e^{-\frac{(k_1-k_{10})^2}{4\sigma_{k_1}^2}} \cdot e^{-\frac{(k_2-k_{20})^2}{4\sigma_{k_2}^2}} \cdot e^{i\left(k_1x+k_2y-\frac{\hbar(k_1^2+k_2^2)}{2m}t\right)} dk_1 dk_2 \quad (11)$$

Der entscheidende Vorteil ist nun, dass man beide Integrale auseinanderziehen kann, da k_1 keine Funktion von k_2 ist.

Man erhält damit:

$$\psi(x, y, t) = \int_{k_1=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k_1-k_{10})^2}{4\sigma_{k_1}^2}} \cdot e^{i\left(k_1x - \frac{\hbar k_1^2}{2m}t\right)} dk_1 \cdot \int_{k_2=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(k_2-k_{20})^2}{4\sigma_{k_2}^2}} \cdot e^{i\left(k_2y - \frac{\hbar k_2^2}{2m}t\right)} dk_2 \quad (12)$$

Somit erhalten wir zwei Integrale, vom gleichen Typ, wie wir sie in der ersten Vorlesung zur Quantenmechanik gelöst haben.

Man kann die Konstante C in zwei Konstanten C_1 und C_2 aufspalten und anschließend das Ergebnis aus der 1. Vorlesung zur Quantenmechanik³ übertragen:

$$\psi(x, y, t) = M(x, y, t) \cdot e^{i\Phi(x, y, t)} \quad (13)$$

$$M(x, y, t) = \frac{C_1 \cdot \sqrt{2\pi} \cdot \sqrt{\sigma_{k_1}}}{\sqrt{\sigma_x(t)}} \cdot e^{-\frac{\left(x - \frac{\hbar k_{10}}{m}t\right)^2}{4\sigma_x^2(t)}} \cdot \frac{C_2 \cdot \sqrt{2\pi} \cdot \sqrt{\sigma_{k_2}}}{\sqrt{\sigma_y(t)}} \cdot e^{-\frac{\left(y - \frac{\hbar k_{20}}{m}t\right)^2}{4\sigma_y^2(t)}} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \Phi(x, y, t) = & \frac{m\left(2mk_{10}x - \hbar k_{10}^2t - 4\sigma_{k_1}^4x^2t\right)}{2m^2 + 8\sigma_{k_1}^4\hbar^2t^2} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{2\sigma_{k_1}^2\hbar t}{m}\right) \\ & + \frac{m\left(2mk_{20}y - \hbar k_{20}^2t - 4\sigma_{k_2}^4y^2t\right)}{2m^2 + 8\sigma_{k_2}^4\hbar^2t^2} + \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{2\sigma_{k_2}^2\hbar t}{m}\right) \end{aligned} \quad (15)$$

$$\sigma_x(t) = \sqrt{\frac{1}{4\sigma_{k_1}^2} + \frac{\hbar^2\sigma_{k_1}^2}{m^2}t^2} \quad (16)$$

$$\sigma_y(t) = \sqrt{\frac{1}{4\sigma_{k_2}^2} + \frac{\hbar^2\sigma_{k_2}^2}{m^2}t^2} \quad (17)$$

$$C_1 = \sqrt{\frac{1}{2\pi \cdot \sqrt{2\pi}\sigma_{k_1}}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot (2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_{k_1}}} \quad (18)$$

$$C_2 = \sqrt{\frac{1}{2\pi \cdot \sqrt{2\pi}\sigma_{k_2}}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot (2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_{k_2}}} \quad (19)$$

Da die Rechnung natürlich völlig analog zur Rechnung im eindimensionalen Fall verläuft, soll sie an dieser Stelle nicht noch einmal gezeigt werden.

Im Programm QMVorl2Pr1.mws wird dann die zeitliche Entwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x, y, t)|^2$ berechnet und graphisch dargestellt, wobei wiederum die Konstanten frei gewählt werden können⁴. Besonders anschaulich ist hierbei die Animation des zeitlichen Verlaufs unter dem Titel *Quantenmechanische Dispersion*. Denn natürlich ist es auch im zweidimensionalen Fall so, dass man mit zunehmender Dauer Information über den wahrscheinlichsten Ort verliert⁵.

³Siehe Skript zur 1. Vorlesung *Quantenmechanik*, Gleichungen (26)-(29).

⁴An dieser Stelle sei wiederum angemerkt, dass man ggf. die Intervallgrenzen der x- bzw. y-Achse verändern muss, so dass Maple in der Lage ist, die Graphik zu erzeugen. Diese Veränderung muss innerhalb der plot3d-Befehle erfolgen!

⁵Siehe hierzu die ausführliche Betrachtung im Skript zur 1. Vorlesung *Quantenmechanik*.

Beispiel 1:

Betrachten wir als erstes Beispiel die folgende Wahl der Konstanten:

$$\sigma_{k_1} = \sigma_{k_2} = 3 \frac{1}{m}, \quad k_{10} = k_{20} = 0$$

Man erhält dann die folgende zeitliche Entwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum:

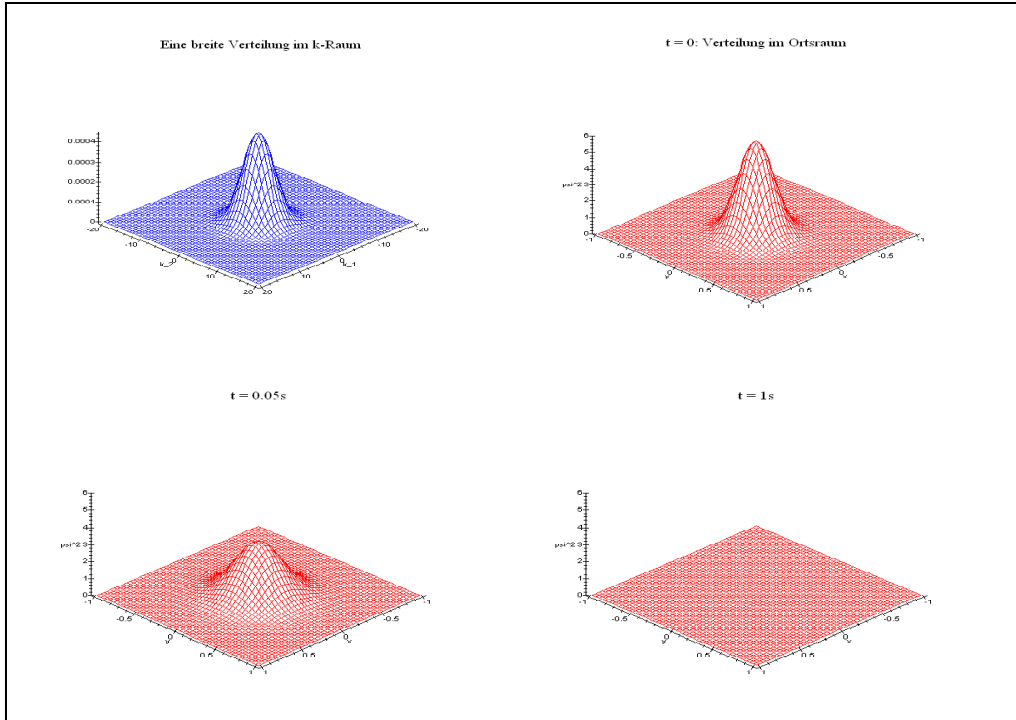


Figure 2: Das linke obere Bild zeigt die Darstellung der Funktion $a(k_1, k_2)^2$. Die Achseneinheiten sind hier m^{-1} für die horizontalen Achsen. Die anderen Darstellungen zeigen die zeitliche Entwicklung von $|\psi(x, y, t)|^2$. Die Einheit der x- bzw. y-Achse ist jeweils m. Man beachte den relativ schnellen Informationsverlust über den Ort des Teilchens!

Man kann dabei sehr schön das Entstehen und Vergehen von Information über den Ort - bzw. die Wahrscheinlichkeit, dass man das Teilchen dort findet - beobachten. Man kann erkennen, dass in diesem Beispiel einer breiten Verteilung im k- bzw. Impulsraum die Amplitude der Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum relativ schnell abnimmt. Dieses Ergebnis: *Je breiter die Verteilung im Impuls⁶, desto schmaler die Verteilung im Ort⁷ und desto schneller der Informationsverlust* ist die HEISENBERG'sche Unbestimmtheitsrelation. Mathematisch wird dieses Verhalten durch die Gleichungen (14) und (15) deutlich.

⁶Mit anderen Worten je ungenauer die Kenntnis über den Impuls des Teilchens.

⁷Mit anderen Worten, desto genauer die Kenntnis über den Ort des Teilchens.

Betrachtet man die obige Darstellung, so wird deutlich, dass man Teilchen bzw. ihre Impuls- u. Aufenthaltswahrscheinlichkeit durch ein solches Wellenpaket sinnvoll beschreiben kann.

Beispiel 2:

Im zweiten Beispiel werden die folgenden Konstanten gewählt:

$$\sigma_{k_1} = \sigma_{k_2} = 0.5 \frac{1}{m}, \quad k_{10} = k_{20} = 0$$

Die Verteilung im k - bzw. Impulsraum ist also schmaler und man erhält nun die folgende zeitliche Entwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte:

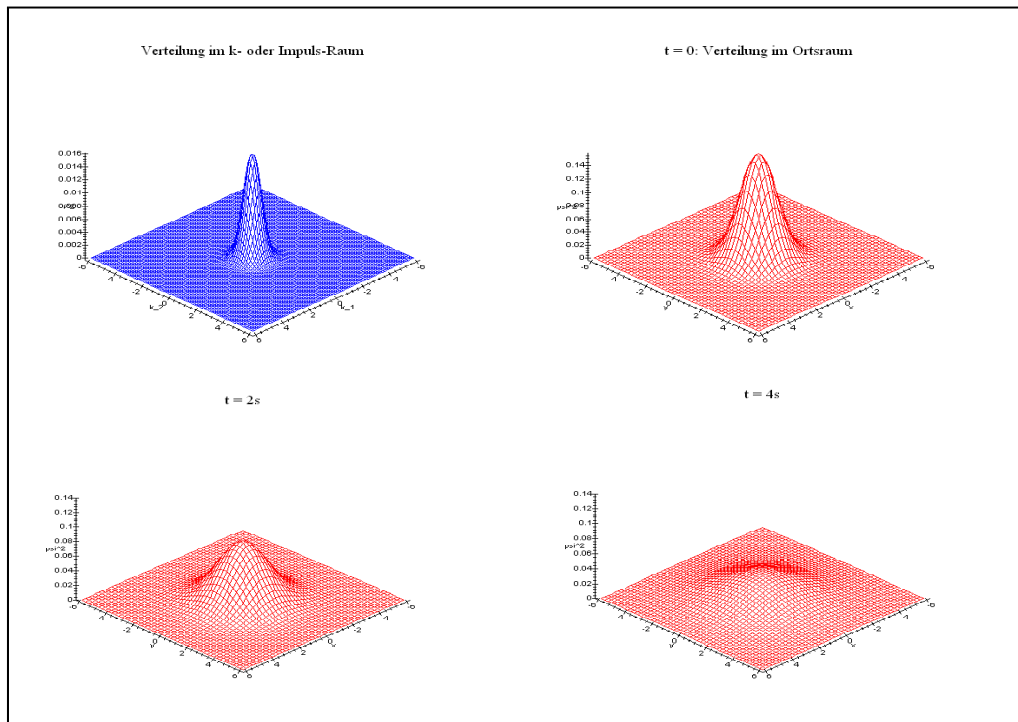


Figure 3: Das linke obere Bild zeigt die Darstellung der Funktion $a(k_1, k_2)^2$. Die Achseneinheiten sind hier m^{-1} für die horizontalen Achsen. Die anderen Darstellungen zeigen die zeitliche Entwicklung von $|\psi(x, y, t)|^2$. Die Einheit der x - bzw. y -Achse ist jeweils m . Man beachte, dass der Informationsverlust über den Ort des Teilchens nun vergleichsweise langsamer geschieht.

Man kann die Unbestimmtheitsrelation noch in weiteren Fällen studieren - dies sei auch im Umgang mit dem Programm QMVorl2Pr1.mws angeraten - und erhält weiter:

Je breiter die Verteilung in der k_x -Variablen, desto schmaler ist die Verteilung in x und umgekehrt!

Je breiter die Verteilung in der k_y -Variablen, desto schmaler ist die Verteilung in y und umgekehrt!

Bemerkung: *Zur Benutzung des Programms QMVorl2Pr1.mws*

Im Programm lassen sich alle diese Fälle vom Benutzer programmieren und graphisch darstellen bzw. durch eine Animation visualisieren. Dabei ist darauf zu achten, dass man innerhalb der Befehle die Intervallgrenzen oder auch die Zeitintervalle ggf. verändern muss, um die gewünschten Bilder auch zu erkennen. Die Veränderung der dafür notwendigen Konstanten geschieht dabei innerhalb der Maple-Befehle! Innerhalb des Programms wird aber auch noch gesondert darauf hingewiesen!

Wir werden im Folgenden in vielen Modellrechnungen annehmen, dass ein Teilchen mit hoher Wahrscheinlichkeit an einem Ort bzw. in einem winzigen Volumen dort lokalisiert wurde⁸. Wir werden dann den Einfluss äußerer Kräfte, z.B. der Coulomb-Anziehung studieren. Dies geschieht dadurch, dass wir diesen Kräften⁹ ein Potenzial zuordnen und dann die SCHRÖDINGER-Gleichung lösen.

Das freie Teilchen, dass wir hier betrachten ist streng genommen natürlich nur ein Modell. Es wirken immer Kräfte auf das Teilchen, seien es elektrische Kräfte oder Gravitationskräfte. Aber wir haben immerhin herausgefunden, dass freie Teilchen so beschrieben werden könnten und dass ihre Aufenthaltswahrscheinlichkeit nachdem sie ein Maximum an einem Punkt angenommen hat, zerfließt. Es gelingt somit nicht die Zukunft eines freien Teilchens vorherzusagen, nachdem man es an einem Punkt bzw. in einem kleinen Volumen um diesen Ort herum lokalisiert hat.

Bemerkung:

Erinnern wir uns nun an die DE BROGLIE Vorstellungen von Welleneigenschaften der Teilchen. DE BROGLIE ordnete ja einem Teilchen mit Impuls p eine Welle mit:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \quad (20)$$

zu. Beachten wir nun die Dispersionsrelation der freien SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} \cdot (k_1^2 + k_2^2) \quad (21)$$

so erkennt man über:

$$p = \hbar k = \hbar \cdot \sqrt{k_1^2 + k_2^2} \quad (22)$$

den Zusammenhang zwischen k - und Impulsraum!

⁸Durch Angabe des Mittelpunktes von $|\psi(x, y, t)|^2$ in einer GAUSS-Funktion.

⁹Wir studieren nur konservative Kräfte!!

3. DIE SCHRÖDINGER-GLEICHUNG FÜR EIN TEILCHEN IN EINEM POTENZIAL

Wir haben festgestellt, dass die SCHRÖDINGER-Gleichung für ein freies Teilchen eigentlich nur ein mathematisches Modell ist. Ein freies Teilchen, also ein Teilchen, auf das keine äußeren Kräfte einwirken, existiert nicht. Wir müssen daher die Situation betrachten, in der das Teilchen der Einwirkung äußerer Kräfte ausgesetzt ist. Dies muss mathematisch in der SCHRÖDINGER-Gleichung berücksichtigt werden. Wir werden aber dabei nur Kräfte betrachten, denen man ein Potenzial zuordnen kann, also konservative Kräfte. Was wir also nicht betrachten sind z. B. Reibungskräfte.

3.1. Konservative Kräfte. Wir gehen von Betrachtungen und Kenntnissen aus der klassischen Mechanik aus, denn dort wird man im allgemeinen mit dem Begriff des Potenzials zum ersten Mal konfrontiert. Wir gehen aus von der NEWTON-Bewegungsgleichung:

$$m \cdot \ddot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}(t)) \quad (23)$$

Mit anderen Worten also "äußere Kräfte sind für die Beschleunigung des Körpers verantwortlich".

Wir multiplizieren nun die NEWTON-Bewegungsgleichung skalar mit $\dot{\mathbf{r}}(t)$ und erhalten:

$$m \cdot \ddot{\mathbf{r}}(t) \cdot \dot{\mathbf{r}}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}(t)) \cdot \dot{\mathbf{r}}(t) \quad (24)$$

Dies können wir dann in der Form:

$$m \cdot \ddot{\mathbf{r}}(t) \cdot \dot{\mathbf{r}}(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{m \cdot \dot{\mathbf{r}}^2(t)}{2} \right) = \mathbf{F}(\mathbf{r}(t)) \cdot \dot{\mathbf{r}}(t) = P \quad (25)$$

Wobei P die am Teilchen geleistete Arbeit pro Zeit, also die Leistung ist. Die zu- oder abgeführte Energie ändert die Geschwindigkeit des Teilchens, daher identifiziert man:

$$E_{\text{kin}} = \frac{m \cdot \dot{\mathbf{r}}^2(t)}{2} \quad (26)$$

als die kinetische Energie des Teilchens, also die mit der Bewegung verbundene Energie des Teilchens.

Wir definieren nun, wenn es eine Funktion $\mathbf{V}(\mathbf{r})$ gibt, mit:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{V}(\mathbf{r}(t)) = -\mathbf{F}(\mathbf{r}(t)) \cdot \dot{\mathbf{r}}(t) \quad (27)$$

so nennt man die äußere Kraft \mathbf{F} konservativ und sagen, die Kraft \mathbf{F} besitzt ein Potenzial $\mathbf{V}(\mathbf{r})$.

Beispiel:

Als kleines Beispiel betrachten wir die eindimensionale Bewegung eines Teilchens unter dem Einfluss der Erdbeschleunigung:

$$m\ddot{x}(t) = -mg \quad (28)$$

Man kann der Gravitationskraft der Erde ein Potenzial zuordnen:

$$V_{\text{Grav}}(x(t)) = mgx(t) \quad (29)$$

denn es gilt:

$$\frac{d}{dt}mgx(t) = mg\dot{x}(t) = -(-mg \cdot \dot{x}(t)) = -(-mg) \cdot \dot{x}(t) \quad (30)$$

und damit wird die Definitionsgleichung erfüllt.

Noch aus der Schule ist der Energieerhaltungssatz für konservative Kräfte bekannt, mathematisch formuliert als:

$$\text{Kräfte konservativ} \implies \frac{m \cdot \dot{\mathbf{r}}^2(t)}{2} + V(\mathbf{r}(t)) = E = \text{const.} \quad (31)$$

Bemerkungen:

1. Als konservative Kräfte im engeren Sinne werden Kräfte bezeichnet, für die gilt:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (32)$$

2. Bewegt man ein Teilchen, das unter der Einwirkung einer konservativen Kraft steht, so hängt die Arbeit, die man verrichtet, um das Teilchen vom Anfangspunkt A zum Endpunkt B zu bringen, nicht vom Weg ab, sondern nur von der Differenz:

$$V(\mathbf{r}(A)) - V(\mathbf{r}(B)) \quad (33)$$

3.2. Die SCHRÖDINGER-Gleichung für ein Teilchen in einem Potenzial.

Im Falle, dass sich das nicht-relativistische Teilchen in einem Potenzial bewegt, mit anderen Worten also eine äußere konservative Kraft auf das Teilchen einwirkt, lautet die SCHRÖDINGER-Gleichung:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \cdot \psi(\mathbf{r}, t) \quad (34)$$

Sie ist nicht aus der freien SCHRÖDINGER-Gleichung ableitbar, sie ist das eigentliche Ergebnis der Arbeiten SCHRÖDINGERS. Er fand sie bei der theoretischen Beschreibung des H-Atoms.

3.3. Die Normierung der Wellenfunktion. Die im Verlauf der Vorlesung *Einführung in die Quantenphysik* behandelten Probleme der Beschreibung von Elektronen führten zur Einführung der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ deren Betragsquadrat die Nachweiswahrscheinlichkeitsdichte des Ortsnachweises eines Teilchens ist, sie ergibt sich als Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung.

Es ist sinnvoll die Wahrscheinlichkeitsdichte folgendermaßen zu normieren:

$$\iiint_{V=R^3} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1 \quad (35)$$

denn ein Teilchen wird ja nachgewiesen.

Wir fügen diese Normierungsbedingung der obigen SCHRÖDINGER-Gleichung hinzu.

3.4. Die eindimensionale zeitunabhängige Schrödingergleichung. Wir setzen in die obige SCHRÖDINGER-Gleichung¹⁰ nun den folgenden Ansatz ein:

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \quad (36)$$

und erhalten damit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\varphi(x) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \right) = \varphi(x) \cdot \left(-i\frac{E}{\hbar} \right) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\varphi(x) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \right) = \varphi''(x) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \end{aligned} \quad (37)$$

und damit:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= -i\hbar \cdot \varphi(x) \cdot \left(-i\frac{E}{\hbar} \right) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \\ &= \varphi(x) \cdot E \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x, t) \cdot \psi(x, t) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} + V(x) \cdot \varphi(x) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \end{aligned} \quad (38)$$

also:

$$\begin{aligned} \varphi(x) \cdot E \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} + V(x) \cdot \varphi(x) \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \\ \varphi(x) \cdot E \cdot e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} &= e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)} \cdot \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x) \cdot \varphi(x) \right) \\ E \cdot \varphi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x) \cdot \varphi(x) \\ 0 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + (V(x) - E) \cdot \varphi(x) \end{aligned} \quad (39)$$

Diese letzte Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + (V(x) - E) \cdot \varphi(x) = 0 \quad (40)$$

bezeichnet man als zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung. E bezeichnet dabei die Energie des Teilchens, aber wir werden das noch sehr genau untersuchen. Es ist diese Gleichung, die wir an einigen Potenzialproblemen studieren werden. Haben wir eine Lösung gefunden so muss man diese nur noch mit $e^{(-i\frac{E}{\hbar}t)}$ multiplizieren und erhält die Lösung der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung für ein Potenzial, das nicht explizit zeitabhängig ist.

¹⁰ Zu berücksichtigen ist nun, dass wir voraussetzen, dass das Potenzial zeitlich konstant sei, also nicht explizit von der Zeit abhängt, was in vielen Fällen der Fall ist.

Bemerkungen:

1. Natürlich schränken wir durch diesen Lösungsansatz die möglichen zu behandelnden Probleme ein. Wir geben die Energie des Teilchen ja als Konstante vor, lassen also nicht zu, dass E vom Ort oder der Zeit abhängen kann! Wir könnten also beispielsweise das Gravitationsproblem durch diesen Ansatz nicht lösen, da ja z.B. beim Fallen eines Steines zu Boden die Energie wohl vom Ort wie von der Geschwindigkeit des Teilchens abhängt. E ist dann keine Zahl, sondern eine Funktion.
2. Hätten wir z.B. in die eindimensionale SCHRÖDINGER-Gleichung für ein Teilchen in einem Potenzial den ganz allgemeinen Wellenansatz:

$$\psi(x, t) = A(x, t) \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S(x, t)} \quad (41)$$

eingesetzt, so müssten wir jetzt ein Gleichungssystem partieller Differenzialgleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} S(x, t) &= \frac{1}{2} \frac{\frac{\partial^2}{\partial x^2} A(x, t)}{A(x, t) \cdot m} - \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{\partial}{\partial x} S(x, t) \right)^2 - \frac{V(x, t)}{\hbar^2} \\ \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} A(x, t) &= -\frac{\hbar}{m} \frac{\partial}{\partial x} A(x, t) \cdot \frac{\partial}{\partial x} S(x, t) - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m} \cdot A(x, t) \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} S(x, t) \end{aligned} \quad (42)$$

lösen, was sehr schwierig werden kann und meistens nur näherungsweise gelöst werden kann. Die Herleitung der beiden Gleichung ist mit Maple kein Problem und kann im Programm "QMV2Pr3.mws" betrachtet werden.

3. Noch eine allgemeine Bemerkung zum Spezialfall des zeitunabhängigen Potenzials: Wir denken dabei an die Bewegung eines Elektrons in der Atomhülle des H-Atoms. Die potenzielle Energie wird solange aus dem zeitunabhängigen Coulomb-Potenzial allein bestimmt, solange keine "zeitabhängige Störung" das Atom von außen beeinflusst. Eine solche zeitabhängige Störung kann z.B. durch eingestrahltes Licht, also eine elektromagnetische Welle oder durch ein das Atom hindurchfliegendes geladenes Teilchen - man denke an die RUTHERFORD-Streuung - verursacht werden. Wir sehen also: Jede Wechselwirkung und damit auch jede am System durchgeführte Messung ist mit einer zeitabhängigen Störung verbunden. Der Spezialfall zeitunabhängiger potenzieller Energie beschreibt also einen idealisierten Grenzfall. Obwohl nach diesen Ausführungen klar sein sollte, dass zeitabhängige Störungen, d.h. Wechselwirkungen, von großer Bedeutung sind, erscheint es doch interessant, zunächst den einfachen Grenzfall einer rein ortsabhängigen potenziellen Energie zu untersuchen. Es ist dies ja ein Vorgehen, was Physiker allgemein bevorzugen: In einem ersten Schritt wird der idealisierte Grenzfall betrachtet. In einem zweiten Schritt versucht man man dann, die Komplikationen, die sich im realen Fall gegenüber dem idealisierten Grenzfall ergeben, zu erfassen.

4. Für die allgemeine SCHRÖDINGER-Gleichung gilt wieder das Superpositionsprinzip, d.h. sind

$$\varphi_n(x), n = 0, 1, 2, \dots$$

Lösungen, d.h. gilt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi_n''(x) + V(x) \cdot \varphi_n(x) = E_n \cdot \varphi_n(x), n = 0, 1, 2, \dots$$

so bildet die jede endliche Superposition:

$$\varphi(x) = \sum_{n=0}^N a_n \varphi_n(x), N = 1, 2, \dots \quad (43)$$

ebenfalls eine Lösung¹¹. Zu beachten ist allerdings, dass die so konstruierte Lösung nicht die passende Lösung zum Energiewert:

$$E = \sum_{n=0}^N E_n \quad (44)$$

ist¹²!! Man kann ebenfalls zeigen, dass auch:

$$\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \quad (45)$$

eine Lösung bildet. Die allgemeine Lösung der zeitabhängigen Lösung erhält man hieraus im Falle diskreter Energiewerte¹³ zu:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \quad (46)$$

Eine endliche Superposition, z.B.:

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^2 a_n \varphi_n(x) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} \quad (47)$$

bildet ebenfalls eine Lösung, jedoch **nicht** zum Energiewert $E = E_1 + E_2$!!

Die allgemeine Lösung im Falle kontinuierlicher Energiewerte¹⁴ wird in der vierten Vorlesung an einem konkreten Beispiel dargestellt. Die Berechnung der Koeffizienten a_n geschieht aus der Anfangsbedingung $\psi(x, 0)$, siehe Vorlesung 3.

3.5. Die Kontinuitätsgleichung. Ein Elektron werde durch die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ beschrieben. Die Wellenfunktion sei zu einem bestimmten Zeitpunkt normiert, d.h. es gelte:

$$\iiint_{V=R^3} |\psi(\mathbf{r}, 0)|^2 d^3r = 1 \quad (48)$$

Diese Normierung bedeutet anschaulich, dass das Elektron zum Zeitpunkt $t = 0$ mit Sicherheit - Wahrscheinlichkeit 1 - irgendwo zu finden ist. Betrachtet man keine Prozesse mit Elektronenvernichtung, so sollte auch die weitere zeitliche Entwicklung

¹¹Den Fall diskreter Energiewerte werden wir bei der Behandlung des harmonischen Oszillators (Skript 11) sowie des H-Atoms (Skript 18) erhalten.

¹²Man setze eine so konstruierte Lösung in die SCHRÖDINGER-Gleichung ein! Ein Teilchen, dass durch eine solche Überlagerung beschrieben wird, hat gar keine definierte Energie, siehe Vorlesung 4.

¹³Die wir z.B. bei der Lösung des harmonischen Oszillators (siehe Skript 11) und bei der Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung des H-Atoms (siehe Skript 18) erhalten.

¹⁴Die ersten Potenzialprobleme, die ab Vorlesung 4 betrachtet werden, führen auf diesen Fall.

von $\psi(\mathbf{r}, t)$ normiert sein. Die SCHRÖDINGER-Gleichung legt diese Normierung nicht fest, man kann aber zeigen, dass sie die Normierung erhält, mit anderen Worten aus der Normierung (48) folgt die Normierung von $\psi(\mathbf{r}, t)$. Die Wellenfunktion ändert sich gemäß:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \cdot \psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (49)$$

der dreidimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung. Kennt man nun $\psi(\mathbf{r}, t)$ zu einem bestimmten Zeitpunkt t , so ergibt sich die Wellenfunktion zu einem Zeitpunkt $t + \delta t$ - mit hinreichend kleinem δt - aus einer Taylorentwicklung:

$$\psi(\mathbf{r}, t + \delta t) = \psi(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \delta t = \psi(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) \cdot \delta t \quad (50)$$

Auf diese Weise legt dann $\psi(\mathbf{r}, t + \delta t)$ die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t + 2\delta t)$ zu einem späteren Zeitpunkt fest. Diese Überlegung führt dann schließlich zur Lösung zu einem beliebigen späteren Zeitpunkt! Für ein bestimmtes System - mathematisch dargestellt durch seinen HAMILTON-Operator \hat{H} - legt die Anfangsbedingung $\psi(\mathbf{r}, 0)$ die Lösung $\psi(\mathbf{r}, t)$ fest. Daher muss aus Gleichung (48) auch die Normierung zu einem späteren Zeitpunkt folgen.

Man kann weiter zeigen, dass mit:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - (\nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)) \cdot \psi(\mathbf{r}, t)] \quad (51)$$

und der Wahrscheinlichkeitsdichte:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \psi(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (52)$$

die Gleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (53)$$

gilt. Diese Gleichung ist in ihrer Struktur aus der Elektrodynamik bekannt¹⁵ und wird dort als Erhaltung der elektrischen Ladung interpretiert. Dort entspricht \mathbf{j} der elektrischen Stromdichte zur Ladungsdichte ρ ! Damit ist aber hier $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ die zur Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\mathbf{r}, t)$ gehörige Stromdichte, also eine *Wahrscheinlichkeitsstromdichte*. Aus der Ähnlichkeit der Gleichung (53) mit der Kontinuitätsgleichung der Elektrodynamik darf nun aber nicht geschlossen werden, dass $\rho(\mathbf{r}, t)$ eine Dichte wie die Ladungsdichte sei und ein Elektron etwa eine verschmierte Ladung der Art

$$-e \cdot \rho(\mathbf{r}, t)$$

habe! Ein Elektron wird experimentell immer als ganzes Teilchen an einer bestimmten Stelle nachgewiesen! Ebenso wie nun in der Elektrodynamik aus der Kontinuitätsgleichung die Erhaltung der Ladung folgt, kann man zeigen, dass aus der *quantenmechanischen Kontinuitätsgleichung* (53) die Erhaltung der Norm folgt¹⁶:

$$\iiint_{V=R^3} |\psi(\mathbf{r}, 0)|^2 d^3r = 1 \Rightarrow \iiint_{V=R^3} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (54)$$

¹⁵Siehe *Einführung in die Quantenphysik* - Vorlesung 3 (6).

¹⁶Siehe beispielsweise in Fließbach: *Quantenmechanik*, B.I. Wissenschaftsverlag 1991, S. 44.

Beispiel: Elektronenstrahl¹⁷

Ein Elektronenstrahl lässt sich durch eine ebene Welle gemäß

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

beschreiben¹⁸. Im Falle

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

haben wir wie wir wissen eine Lösung der freien SCHRÖDINGER-Gleichung. Für die Stromdichte erhält man:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = |A|^2 \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \frac{\mathbf{p}}{m} = \rho(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{v} \quad (55)$$

Die Wellenfunktion entspricht somit also einer konstanten Wahrscheinlichkeitsstromdichte! Ihre Normierung - der Wert von A - kann so gewählt werden, dass die Stromdichte \mathbf{j} der elektrischen Stromdichte des Elektronenstrahls entspricht.

Wir werden nun im folgenden zuerst einfachere Probleme mit der eindimensionalen SCHRÖDINGER-Gleichung lösen, die behandelten Probleme stellen Modellprobleme dar. Man kann jedoch diese Modelle zur Beschreibung realer Naturvorgänge benutzen und natürlich die mathematischen Ergebnisse mit den experimentellen Resultaten vergleichen.

¹⁷Siehe hierzu auch die Bemerkungen im Skript 4 zur *Quantenmechanik*. An dieser Stelle soll nur gezeigt werden, dass die benutzte Wellenfunktion zu einer konstanten Stromdichte \mathbf{j} führt.

¹⁸Die experimentellen Ergebnisse, z.B. der Doppelspaltversuch zwingen dazu, Elektronen über eine Wellenfunktion zu beschreiben - siehe *Einführung in die Quantenphysik*, Vorlesung 18. Die konstante Wahrscheinlichkeitsdichte, die man in diesem Falle erhält, ist so zu verstehen, dass das "Messvolumen" dV sich innerhalb des Elektronenstroms befindet. Die Nachweiswahrscheinlichkeit ist dann konstant, sofern man annimmt, dass sich alle Elektronen mit einer konstanten mittleren Geschwindigkeit bewegen. Es ist somit klar, dass diese Wellenfunktion nur den Bereich des Elektronenstrahls beschreibt und außerhalb verschwindet!