

Vorlesungen über Quantenmechanik - Vorlesung 3

JOCHEN GEPPERT / DIDAKTIK DER PHYSIK

Wintersemester

ABSTRACT. Inhalt dieser Vorlesung ist die Anbindung des abstrakten quantenmechanischen Formalismus' an das Experiment. In diesem Zusammenhang wird die HEISENBERG-Unschärferelation an einem Beispiel quantenmechanisch korrekt abgeleitet und in ihrer Aussage verdeutlicht.

1. DER HAMILTON-OPERATOR

Maple-Datei zur Vorlesung:

- QMVorl3Pr1.mws (Eigenwertgleichung des Impulsoperators, FOURIER-Transformation)

Im folgenden werden wir die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung unter einem etwas anderen mathematischen Gesichtspunkt betrachten. Dies bedeutet aber keine prinzipielle Verkomplizierung der Situation, erleichtert aber die Betrachtungsweise. Wir beginnen mit einer allgemeinen Betrachtung von **Operatoren**.

1.1. Ein Operator ist eine besondere Funktion. Im bisherigen Verlauf der Vorlesung sind uns Operatoren bereits begegnet, man denke nur an den *Nabla-Operator* oder den *LAPLACE-Operator*. Wir gehen nun zuerst einen Schritt zurück und betrachten den Prozess der Differenziation einer Funktion:

$$f(x) \longrightarrow \frac{d}{dx} f(x) \quad (1)$$

Man kann nun das Ergebnis dieses Rechenprozesses, auch "als Werk" des Operators $\frac{d}{dx}$ vermöge der Anleitung:

"Nimm die Funktion und differenziere sie nach x"

verstehen. Mathematisch symbolisiert man dies durch:

$$f(x) \longrightarrow \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} f(x) \quad (2)$$

analog zur Darstellung von Funktionen:

$$x \longrightarrow^f f(x) \quad (3)$$

Diese Analogie kann man auch im tieferen Sinne verstehen, die Funktion f ordnet der Variable x den Wert $f(x)$ zu. Entsprechend ordnet der Differenziationsoperator $\frac{d}{dx}$ einer Funktion f ihre Ableitung $\frac{d}{dx} f(x)$ zu. Man kann auf diese Weise auch noch andere Operatoren definieren, wie die Wurzel:

$$f(x) \longrightarrow \sqrt{f(x)} \quad (4)$$

oder einen Multiplikationsoperator:

$$f(x) \xrightarrow{x \cdot} x \cdot f(x) \quad (5)$$

Bemerkungen:

1. **Operator \hat{A}** = Vorschrift, durch die jeder Funktion $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ eindeutig eine Funktion $g(x_1, x_2, \dots, x_n)$ zugeordnet wird. Man schreibt dann:

$$g(x_1, x_2, \dots, x_n) = \hat{A}f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (6)$$

2. Das **Produkt von Operatoren**¹ wird auf die folgende Weise definiert:

$$g(x_1, x_2, \dots, x_n) = \hat{A}\hat{B}f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (7)$$

betrachten wir als Beispiel:

$$\hat{A} = \frac{\partial}{\partial x_1}, \quad \hat{B} = x_1. \quad (8)$$

dann erhält man:

$$\begin{aligned} g(x_1, x_2, \dots, x_n) &= \frac{\partial}{\partial x_1}(x_1 \cdot f(x_1, x_2, \dots, x_n)) \\ &= f(x_1, x_2, \dots, x_n) + x_1 \cdot \frac{\partial}{\partial x_1}f(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (9)$$

Man kann an diesem Beispiel schon erkennen, **das Operatoren im allgemeinen nicht vertauschbar sind**. Es gilt also im allgemeinen nicht:

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A} \quad (10)$$

Denn wendet man unsere Beispieloperatoren in umgekehrter Reihenfolge an, so erhält man:

$$\begin{aligned} \tilde{g}(x_1, x_2, \dots, x_n) &= x_1 \cdot \frac{\partial}{\partial x_1}f(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ &\neq f(x_1, x_2, \dots, x_n) + x_1 \cdot \frac{\partial}{\partial x_1}f(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad \forall f(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{aligned} \quad (11)$$

3. **Lineare Operatoren:** \hat{A} heißt linearer Operator, wenn gilt:

$$\begin{aligned} \hat{A}(\psi_1 + \psi_2) &= \hat{A}\psi_1 + \hat{A}\psi_2 \\ \hat{A}(c \cdot \psi) &= c \cdot \hat{A}\psi \quad \forall \text{ Konstanten } c \end{aligned} \quad (12)$$

Man beachte, dass **die meisten in der Physik vorkommenden Operatoren lineare Operatoren** sind, z.B.

$$\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial t} \text{ und alle Linearkombinationen hiervon} \quad (13)$$

Ein **Beispiel für einen nicht-linearen Operator** ist die Quadratbildung:

$$f(x) \xrightarrow{\quad}^2 (f(x))^2 \quad (14)$$

denn es gilt:

$$(\psi_1 + \psi_2)^2 = \psi_1^2 + \psi_2^2 + 2\psi_1 \cdot \psi_2 \neq \psi_1^2 + \psi_2^2 \quad (15)$$

¹Man versteht darunter auch die aufeinanderfolgende Anwendung der Operatoren.

1.2. Eigenwert und Eigenfunktion eines Operators. Wir müssen diesen kurzen Einstieg in die Operatorentheorie noch um einen wichtigen Punkt ergänzen, der nicht weiter schwierig ist. Jedoch ist er im Rahmen der Anbindung der Quantentheorie an konkrete Messungen von einer sehr wichtigen Bedeutung. Es handelt sich dabei um die Begriffe *Eigenfunktion* und *Eigenwert* eines Operators.

Betrachten wir die **Eigenwertgleichung eines beliebigen Operators \hat{A}** :

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi \quad (16)$$

Kann man diese Gleichung lösen, d. h. findet man zu einem gegebenem Operator \hat{A} eine solche Funktion ψ und eine Konstante λ , so nennt man diese Funktion **Eigenfunktion** und die Konstante den zugehörigen **Eigenwert**.

Betrachten wir als Beispiel den Differenziationsoperator $\frac{\partial}{\partial x}$:

$$\frac{\partial}{\partial x} e^{\lambda x} = \lambda \cdot e^{\lambda x} \quad (17)$$

so erkennen wir, dass $e^{\lambda x}$ Eigenfunktion des Differenziationsoperators zum Eigenwert λ ist.

1.3. Die Interpretation der zeitunabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung als Eigenwertgleichung des HAMILTON-Operators. Betrachten wir noch einmal die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung die durch einen Separationsansatz für ein Teilchen in einem zeitunabhängigen Potenzial entstanden war. Zur Verdeutlichung beschränken wir uns auf eine Dimension:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x) + V(x) \cdot \varphi(x) = E \cdot \varphi(x) \quad (18)$$

Man kann diese Gleichung auch als Eigenwertgleichung des sogenannten **HAMILTON-Operators**:

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \cdot \quad (19)$$

lesen und die zeitunabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung als:

$$\hat{H}\varphi(x) = E \cdot \varphi(x) \quad (20)$$

schreiben. Wir suchen also die Eigenfunktionen des HAMILTON-Operators - der sich durch die spezielle Gestalt des Potenzials unterscheidet - sowie den zugehörigen Eigenwert E , der der Energie des Teilchens entspricht. Zu beachten ist, dass es sich bei diesen Energiewerte immer um Erwartungswerte² handelt- siehe zur Definition S.6 in diesem Skript.

²Es handelt sich um den Mittelwert der Energie-Messung an Teilchen, die alle im gleichen Zustand - beschrieben durch eine Wellenfunktion - sind.

1.4. Der Impulsoperator. Betrachten wir noch einmal den **HAMILTON-Operator**:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

der der **Gesamtenergieoperator eines Teilchens mit der Masse m** ist. Dabei entspricht der erste Operator dem **Operator der kinetischen Energie**:

$$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (21)$$

Analog zur klassischen Beziehung:

$$E_{kin} = \frac{p_x^2}{2m} \quad (22)$$

entwickelt man nun den **Impulsoperator der Bewegung in x-Richtung**:

$$\hat{E}_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Rightarrow \hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \right) \quad (23)$$

Hieraus folgt dann:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (24)$$

Da diese Definition sinnvoll ist, ergibt sich aus einem Vergleich der Theorie mit dem Experiment. Da man nun einen Impulsoperator besitzt, kann man den **Erwartungswert für den Impuls in x-Richtung**³ für ein System beschrieben durch $\psi(x, t)$ ⁴, definieren:

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot \hat{p} \cdot \psi(x, t) \cdot dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \cdot (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, t) \cdot dx \quad (25)$$

Wir werden diesen Operator noch gebrauchen, um den Drehimpulsoperator zu definieren (siehe Skript 16).

Analog findet man den **Impulsoperator in drei Dimensionen**:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (26)$$

Die **Eigenwertgleichung des Impulsoperators** lautet dann gemäß Gleichung (16):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{p} \cdot \psi(\mathbf{r}, t) \\ -i\hbar \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \psi(\mathbf{r}, t) &= \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} \cdot \psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (27)$$

³Dieser Erwartungswert ist der wahrscheinlichste Wert den man bei der Impulsmessung erhält.

⁴Mit anderen Worten, das physikalische System befindet sich nun im Zustand, beschrieben durch $\psi(x, t)$. Aus der Zustandsfunktion $\psi(x, t)$ lassen sich alle physikalisch relevanten Information - z.B. wahrscheinlichster Ort und wahrscheinlichster Impuls in Abhängigkeit von t - berechnen.

Diese partielle Differenzialgleichung lässt sich mit Maple im eindimensionalen Fall lösen und dies wird im zugehörigen Maple-Programm auch durchgeführt. Man erhält als Lösung:

$$\psi(x, t) = e^{i\frac{p}{\hbar}x} \cdot f(t) \quad (28)$$

wobei die Funktion $f(t)$ frei wählbar ist. Man wählt im Allgemeinen⁵:

$$f(t) = e^{-i\frac{p^2}{2m}t} = e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \quad (29)$$

wenn man die DE BROGLIE-Beziehung $p = \hbar k$ beachtet. Man erhält somit im eindimensionalen Fall die folgende **Eigenfunktion zum Impulseigenwert p** :

$$\psi_p(x, t) = e^{i\frac{p}{\hbar}x} \cdot e^{-i\frac{p^2}{2m}t} \quad (30)$$

Dies kann man verallgemeinern auf den dreidimensionalen Fall:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar} - \frac{p^2}{2m}t\right)} \quad (31)$$

Mit dieser Funktion, die wir bereits in der ersten Vorlesung zur Quantenmechanik kennen gelernt haben, stehen wir allerdings vor dem Problem, dass sie nicht normierbar ist, denn es gilt:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \left| e^{i\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar} - \frac{p^2}{2m}t\right)} \right|^2 = 1 \quad (32)$$

Der **Ortserwartungswert eines Teilchens der Masse m** , mathematisch beschrieben durch die Eigenfunktion des Impulsoperators ist:

$$\langle r \rangle = \int_{V=R^3} r \cdot |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = \infty !? \quad (33)$$

Wie bereits aus der 2. Vorlesung Quantenmechanik wissen, ist es sinnvoll als Wellenfunktion eines Teilchens der Masse m die GAUSS-Funktion bzw. das zugehörige FOURIER-Integral anzuwenden, um dem obigen Widerspruch zu entgehen.

Im Folgenden soll nun der recht abstrakte Formalismus der Quantenmechanik an die experimentelle Wirklichkeit angebunden werden, um so den Zusammenhang zwischen Theorie und Experiment näher zu beleuchten.

⁵ Auf diese Weise wird der Separationsansatz der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung für die Eigenfunktion des Impulsoperators beachtet.

2. DIE ANBINDUNG DES QUANTENMECHANISCHEN FORMALISMUS' AN DAS PHYSIKALISCHE EXPERIMENT

2.1. Das Korrespondenzprinzip. Den Erwartungswert des Ortes und des Impulses haben wir aus der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ - die Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung sei im folgenden bekannt - ausgerechnet. Wie lassen sich nun entsprechend andere Erwartungswerte für andere Größen, z.B. Drehimpuls, kinetische Energie etc. berechnen? In der klassischen Physik sind derartige messbare Größen stets aus dem Ort \mathbf{r} und dem Impuls \mathbf{p} eindeutig zu berechnen. In der Quantenmechanik hat sich ein Übersetzungsschlüssel als sinnvoll erwiesen, der durch Experimente in eindeutiger Weise bestätigt wird. Er gilt neben der SCHRÖDINGER-Gleichung und der Bedeutung von $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ als weiteres Axiom der Quantenmechanik, das sogenannte **Korrespondenzprinzip**:

Jeder physikalischen Messgröße („Observable“) F , die in der klassischen Physik durch die Funktion $F(r, p)$ beschrieben wird⁶, entspricht in der Quantenmechanik ein Operator \hat{F} , den man erhält, wenn man in $F(r, p)$ r durch $\hat{r} = r$ und p durch $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ ersetzt.

Bemerkung:

Die Operatoren können allerdings nicht in eindeutiger Weise gebildet werden! Eine einzelne Operatordefinition hängt davon ab, inwiefern die mit dieser speziellen Definition errechneten Ergebnisse die experimentellen Daten beschreiben.

Für den Erwartungswert der Observablen F gilt:

$$\langle F \rangle_\psi = \int_{V=R^3} \psi^*(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{F} \psi(\mathbf{r}, t) \cdot d^3r \quad (34)$$

Man fügt auch den Index ψ an, um daran zu erinnern, dass das Teilchen, an dem man eine Messung durchführt, durch die Wellenfunktion beschrieben wird. Der Erwartungswert eines Operators entspricht dabei dem Mittelwert der Messung der zu ihm gehörenden physikalischen Größe. Das Messresultat einer physikalisch messbaren Größe muss stets reell sein! Mit dieser Forderung kommen wir schon zum nächsten wichtigen Begriff:

2.2. HERMITE-Operatoren. Durch die experimentell sinnvolle Bedingung:

$$\langle F \rangle = \text{reell} \quad (35)$$

wird eine ganz besondere Klasse von Operatoren aus allen möglichen mathematischen Operatoren ausgesondert, nämlich die sogenannten hermiteschen Operatoren. In der Physik haben offenbar nur die HERMITE-Operatoren einen vernünftigen Sinn. Beispielsweise sind der HAMILTON- wie auch der Orts- und Impulsoperator HERMITE-Operatoren.

⁶ Beachte, dass die Funktion $F(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ in kartesischen Koordinaten dargestellt ist. **Das Korrespondenzprinzip gilt nur in kartesischer Darstellung!**

2.3. Die Unschärfe eines Operators. Für einen beliebigen Operator⁷ \hat{A} definiert man die **Breite** oder auch die **Unschärfe** durch den folgenden Erwartungswert:

$$\delta_{A_\psi} := \sqrt{\left\langle \left(A - \langle A \rangle_\psi \right)^2 \right\rangle_\psi} = \sqrt{\langle A^2 \rangle_\psi - \langle A \rangle_\psi^2} \quad (36)$$

Diese Formel erinnert an die sogenannte mittlere Schwankungsbreite aus der Mess-theorie: Wiederholt wird ein Wert x gemessen. Man erhält dann durch die bekannte Mittelwertbildung einen Mittelwert \bar{x} um den die anderen Messwerte herum streuen, die mittlere Schwankungsbreite bei n Messungen berechnet sich dann durch:

$$\delta_x = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (37)$$

Diese Formel aus der klassischen Physik kann in der Quantenmechanik so nicht angewendet werden, da wir ein Teilchen jetzt konkret durch eine Wellenfunktion beschreiben müssen⁸.

Man nennt einen Messwert „scharf“, wenn bei wiederholten Messungen ein- und derselben Messgröße (z.B. des Impulses) identische Werte gemessen werden. Ist dies nicht der Fall, streuen also die Messwerte um einen Mittelwert herum, heißt der Messwert „unscharf“.

Damit ist natürlich klar, dass der Messwert A (repräsentiert in der QM durch den Operator \hat{A}) scharf ist, wenn:

$$\delta_{A_\psi} = 0 \Leftrightarrow A \text{ ist scharf} \quad (38)$$

Weiter kann man zeigen: Befindet sich ein Teilchen in einem durch die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ beschriebenen Zustand, so hat die Observable F den scharfen Wert F_0 genau dann, wenn die Gleichung:

$$\hat{F}(\psi(\mathbf{r}, t)) = F_0 \cdot \psi(\mathbf{r}, t)$$

gilt. Solange also das Teilchen in einem Zustand sich befindet, der ein Eigenzustand der zu messenden Observable ist, solange wird immer der Messwert F_0 gemessen. Eigenwerte sind also scharfe Messwerte, wenn die Eigenfunktion zum Eigenwert die Zustands- oder Wellenfunktion ist.

2.4. Die Entwicklung einer Wellenfunktion nach Eigenfunktionen eines HERMITE-Operators. Eine derartige Entwicklung kennen wir bereits aus der ersten Vorlesung *Quantenmechanik*. Dort haben wir die allgemeine Lösung der freien SCHRÖDINGER-Gleichung als FOURIER-Integral angegeben⁹:

$$\psi(x, t) = \int_{k=-\infty}^{\infty} a(k) \cdot e^{i\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} dk \quad (39)$$

⁷Natürlich arbeitet man, wie im vorherigen erläutert in der Quantenmechanik nur mit hermiteschen Operatoren. Trotzdem gelten die folgenden Überlegungen auch für Operatoren, die nicht hermitesch sind.

⁸Das heißt mit anderen Worten, die Wellenfunktion muss auch in der Anbindung an die konkreten Messergebnisse auftauchen. Siehe dazu insbesondere Gleichung (60) in diesem Skript, S.14.

⁹Siehe Skript 1 zur *Quantenmechanik*, Gleichung (14).

Beachten wir jetzt die DE BROGLIE-Beziehung $p = \hbar k$, so lässt sich obiges Integral auch schreiben als:

$$\psi(x, t) = \int_{p=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\hbar} a\left(\frac{p}{\hbar}\right) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)} dp \quad (40)$$

Diesen Sachverhalt beschreibt man auch in der folgenden Weise:

Das FOURIER-Integral stellt eine Entwicklung der Wellenfunktion nach den Eigenfunktionen $e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)}$ des Impulsoperators $p_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$ dar.

Da der Impuls auch in der Quantenmechanik kontinuierliche Werte annehmen kann, wird die kontinuierliche Überlagerung durch das Integral über p beschrieben. Für diskrete Werte, wie z.B. die Energie eines Teilchens in einem harmonischen Oszillatorpotenzial¹⁰ erhält man nur diskrete Eigenwerte zu diskreten Eigenfunktionen und die Überlagerung wird durch eine Summe ausgedrückt. Bevor wir uns diesen Sachverhalt näher betrachten, wird nun noch ohne Beweis ein Satz aus der Mathematik mitgeteilt:

Die Eigenfunktionen eines HERMITE-Operators (41)

bilden einen vollständigen Satz orthogonaler Funktionen nach denen jede Funktion entwickelt werden kann. (42)

Da die den physikalischen Messgrößen, den Observablen F , zugeordneten Operatoren \hat{F} stets HERMITE-Operatoren, also solche mit reellen Eigenwerten sind, ergibt sich hiermit als Lösung der SCHRÖDINGER-Gleichung ein Rezept für die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$:

Man verwendet hierzu der Bequemlichkeit wegen ein **System von normierten Eigenfunktionen**. Funktionen, die orthogonal und normiert sind, heißen **orthonormiert**, zwei Funktionen $f_n(\mathbf{r})$, $f_m(\mathbf{r})$ sind also genau dann orthonormiert, wenn folgende Bedingungen gelten:

$$\begin{aligned} \int_{V=R^3} |f_n(\mathbf{r})|^2 dV &= 1 \\ \int_{V=R^3} f_n^*(\mathbf{r}) \cdot f_m(\mathbf{r}) \cdot dV &= 0 \end{aligned} \quad (43)$$

Bilden diese Funktionen einen vollständigen Satz orthonormierter Funktionen eines Operators \hat{F} , so lässt sich die den Zustand eines Teilchens beschreibende Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$, die im allgemeinen keine Eigenfunktion des Operators \hat{F} ist, stets als Entwicklung nach diesen Eigenfunktionen beschreiben.

Angenommen der Operator \hat{F} habe N ¹¹ diskrete Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ und die Funktionen $f_1(\mathbf{r}, t), \dots, f_N(\mathbf{r}, t)$ seien die dazu gehörenden Eigenfunktionen, die einen vollständigen orthonormierten Satz bilden. Dann kann man die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$ nach

¹⁰Siehe Skript 11 zur *Quantenmechanik*.

¹¹Der Fall $N \rightarrow \infty$ ist ausdrücklich erlaubt und in der Quantenmechanik sogar der häufigste!

diesen Eigenfunktionen entwickeln:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N c_i \cdot f_i(\mathbf{r}, t) \quad (44)$$

Dabei ist es durchaus erlaubt, dass die Koeffizienten c_i auch komplex sind. Die Bedeutung dieser Entwicklungskoeffizienten soll nun näher untersucht werden. Diese liegt vor allem in der Vorhersagbarkeit der Messgröße F bei Kenntnis der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$. Wir wissen bereits: Ist $\psi(\mathbf{r}, t)$ eine Eigenfunktion des Operators \hat{F} , so führt eine Messung von F stets zu dem dieser Eigenfunktion zugeordneten, scharf definierten Eigenwert. Im allgemeinen ist aber $\psi(\mathbf{r}, t)$ aber keine Eigenfunktion des Operators \hat{F} . In diesem Fall kann man aber wenigstens die Wahrscheinlichkeit P_j angeben, mit der eine Messung von F das Messresultat λ_j , $j=1\dots N$ erhalten wird¹²:

$$P_j = |c_j|^2 \quad (45)$$

Beispiel: HAMILTON-Operator

Der HAMILTON-Operator ist ein HERMITE-Operator, da seine Eigenwerte die messbaren Energiewerte eines physikalischen Systems (z.B. des H-Atoms) bilden. Die zugehörigen Eigenfunktionen bilden somit also einen vollständigen Satz von orthogonalen Funktionen. Wir setzen nun voraus, dass das Eigenwertproblem:

$$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n \cdot \varphi_n(x), n = 0, 1, 2, \dots \quad (46)$$

gelöst sei¹³. Es sei eine physikalische Anfangsbedingung bekannt, die durch $\psi(x, 0)$ beschrieben werde¹⁴. Dann kann man diese Anfangsbedingung nach den Eigenfunktionen des HAMILTON-Operators entwickeln:

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x) \quad (47)$$

und wir können die Koeffizienten a_n durch Integration bestimmen (siehe (42)):

$$\int_{x=-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) \varphi_m(x) dx = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_{x=-\infty}^{\infty} \varphi_n(x) \varphi_m(x) dx = a_m \quad (48)$$

Das Betragsquadrat $|a_n|^2$ gibt nun die Wahrscheinlichkeit dafür an, dass der Anfangszustand des Systems $\psi(x, 0)$ dem Eigenzustand $\varphi_n(x)$ entspricht und damit das System die Energie E_n besitzt!

Bemerkung:

Man kann nun allerdings nicht argumentieren, dass der Anfangszustand $\psi(x, 0)$ in

¹²Ein Beweis dieser Aussage findet man in allen Lehrbüchern zur Quantenphysik, siehe z.B. in Lindström, Langkau, Quantenphysik, Vieweg-Verlag 1996.

¹³Wir betrachten also wiederum den Fall, dass wir als Lösung diskrete Energiewerte erhalten. Diesen Fall werden wir beim harmonischen Oszillator (Skript 11) aber auch beim H-Atom (Skript 18) erhalten.

¹⁴Ein konkretes Beispiel für diesen Fall wird im Skript 11 zum harmonischen Oszillator durchgerechnet!

jedem Fall einem der Energiewerte E_i entspricht und man dann durch die Messung schließlich den richtigen gemäß seiner Wahrscheinlichkeit findet¹⁵! Diese Argumentation führt nämlich zu Widersprüchen zum Experiment. Man könnte nämlich dann annehmen, dass z.B. ein Teilchen, dass wir durch $\psi(x, 0)$ beschreiben, auch irgendeinen der Impulse:

$$p_i = \sqrt{2mE_i - E_{pot}(x_i)}, i = 0, 1, 2, \dots \quad (49)$$

mit der Wahrscheinlichkeit $|a_i|^2$ besitzt, sowie sich mit der gleichen Wahrscheinlichkeit am Ort x_i befindet. Diese Argumentation, die der klassischen statistischen Physik entspricht, führt zu Widersprüchen¹⁶. Der obige Energiesatz gilt nämlich streng genommen nur für die Erwartungswerte:

$$\langle p_i \rangle = \sqrt{2mE_i - \langle E_{pot}(x_i) \rangle} \quad (50)$$

Zusammenfassung: *Anbindung des Formalismus' an das Experiment*

In der Quantenphysik wird der Zustand eines physikalischen Systems, z.B. eines H-Atoms oder eines Elektrons in einem Magnetfeld durch eine Zustands- oder Wellenfunktion beschrieben. Diese Wellenfunktion ist aus der SCHRÖDINGER-Gleichung zu berechnen, wobei dies in vielen Fällen nur näherungsweise möglich ist (z.B. für das He-Atom). Bei einer Messung einer physikalischen Größe, z.B. des Impulses oder Drehimpulses eines Teilchens¹⁷ ordnet man dem Impuls oder Drehimpuls vermöge des Korrespondenzprinzips einen Operator zu. Die Eigenwerte dieses Operators sind die möglichen Messwerte, die bei einer Messung gemessen werden können. Ist die Wellenfunktion eines Teilchens eine Eigenfunktion des Operators, so wird der dazu gehörende Eigenwert - also der Messwert für Impuls oder Drehimpuls - mit Sicherheit gemessen. Er ist also scharf. Andernfalls kann jeder Eigenwert mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit gemessen werden. Wie groß diese Wahrscheinlichkeit ist, kann durch die obige Entwicklung, ausgedrückt durch die beiden Gleichungen (41) und (42) bestimmt werden.

¹⁵In der Weise, dass man 100000 mal die Energie des Anfangszustandes misst - der nach jeder Messung wieder in den Ausgangszustand vor der Messung zurückversetzt wird - und man als Ergebnis z.B. 23000 mal den Wert E_1 misst.

¹⁶Einen direkten Widerspruch zur HEISENBERG-Unschärferelation können wir schon an dieser Stelle bemerken. Die Frage, die noch nicht geklärt ist, ist ihr Wirklichkeitscharakter.

¹⁷Beschrieben wird dieser Zustand durch die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t)$.

3. DIE HEISENBERG-UNBESTIMMTHEITSRELATION

Wir haben bereits in der zweiten Vorlesung zur Quantenmechanik im Zusammenhang mit den GAUSS-Wellenpaketen die mathematische Beobachtung gemacht, dass eine scharfe Zentrierung des Wellenpaket im Ortsraums zu einer breiteren Verteilung im Impulsraum führt und umgekehrt. Es scheint so zu sein, dass man eine scharfe Verteilung für beide Größe nicht erreichen kann. Dieses zunächst rein mathematische Ergebnis haben wir als Unbestimmtheitsrelation HEISENBERGs kennengelernt¹⁸. Wahrscheinlich ist diese Beziehung:

$$\sigma_x \cdot \sigma_y \geq \frac{\hbar}{2} \quad (51)$$

eine der wichtigsten der gesamten Physik und in ihrer experimentellen Bedeutung ist sie lange Zeit umstritten gewesen.

Im Folgenden soll sie noch einmal mit den Möglichkeiten Maples verdeutlicht werden, wobei ein besonderer Augenmerk auf die Beziehung zwischen den uns bis jetzt bekannten Breiten σ_x und $\sigma_p = \hbar \cdot \sigma_k$ der GAUSS-Funktionen und den in dieser Vorlesung eingeführten Unschärfen der zugehörigen Operatoren für den Ort bzw. Impuls gelegt wird.

3.1. FOURIER-Transformation. Betrachten wir noch einmal das FOURIER-Integral:

$$\psi(x, t) = \int_{p=-\infty}^{\infty} \frac{1}{\hbar} a\left(\frac{p}{\hbar}\right) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{p^2}{2m}t\right)} dp$$

Setzen wir die Funktion $\frac{1}{\hbar} a\left(\frac{p}{\hbar}\right)$, die wir beliebig wählen können, als GAUSS-Funktion an:

$$\frac{1}{\hbar} a\left(\frac{p}{\hbar}\right) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_p}} \cdot e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\sigma_p^2}} \quad (52)$$

so erhält man das folgende FOURIER-Integral:

$$\psi(x, t) = \int_{p=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_p}} \cdot e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\sigma_p^2}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{p^2}{2m}t\right)} dp \quad (53)$$

Wir fassen den Integranden nur etwas anders zusammen und erhalten:

$$\psi(x, t) = \int_{p=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_p}} \cdot e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\sigma_p^2}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}t} \cdot e^{i \frac{p}{\hbar}x} dp \quad (54)$$

Mit der Definition:

$$\phi(p, t) := \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_p}} \cdot e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\sigma_p^2}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}t} \quad (55)$$

¹⁸Siehe Skript zur Vorlesung 1: *Quantenmechanik*.

folgt daraus:

$$\psi(x, t) = \int_{p=-\infty}^{\infty} \phi(p, t) \cdot e^{i\frac{x}{\hbar}p} dp \quad (56)$$

Man sagt, dass *die beiden Funktionen $\psi(x, t)$ und $\phi(p, t)$ vermöge einer FOURIER-Transformation miteinander verbunden sind*. Die FOURIER-Transformierte der Funktion $\phi(p, t)$ ist die Funktion $\psi(x, t)$ und umgekehrt. Dabei hat die Umkehrtransformation die folgende Gestalt:

$$\phi(p, t) = \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi(x, t) \cdot e^{-i\frac{x}{\hbar}p} dx \quad (57)$$

Maple ist in der Lage zu einer beliebigen Funktion $f(x)$ die FOURIER-Transformierte gemäß:

$$F(p) = \int_{p=-\infty}^{\infty} f(x) \cdot e^{-ixp} \cdot dx$$

zu berechnen. Dabei gibt man nur die Funktion $f(x)$ an und Maple gibt als Ergebnis die Funktion $F(p)$ zurück. Dies entspricht unserer Transformation für einen festgewählten Zeitpunkt $t = t_0$. Im Programm wird dann die Funktion noch über:

$$N^2 \cdot \int_{p=-\infty}^{\infty} |F(p)|^2 dp = 1 \quad (58)$$

normiert.

Da die Zeitabhängigkeit für die folgenden Überlegungen keinen Einfluss hat, können wir auch mit Maple die HEISENBERG-Unschärferelation ableiten.

Wir werden im Folgenden die HEISENBERG-Unschärferelation analog zum Vorgehen HEISENBERGs 1926 ableiten¹⁹. Dazu betrachten wir ein kräftefreies Teilchen, dessen zeitunabhängige freie SCHRÖDINGER-Gleichung analog zur Entwicklung von Gleichung (25) aus dem ersten Skript zur *Quantenmechanik* die folgende normierte Wellen- oder Zustandsfunktion besitzt:

$$\psi(x) = f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_x}} \cdot e^{\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right)} \cdot e^{i\frac{p_0}{\hbar}x} \quad (59)$$

$$\int_{x=-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (60)$$

Im zur Vorlesung gehörenden Programm kann man nun die Parameter σ_x und p_0 frei wählen und Maple berechnet für diese Wahl jeweils die FOURIER-Transformierte

¹⁹Wir werden allerdings nicht den allgemeinen Fall zeigen, sondern die Herleitung nur an einem Sonderfall vorführen. Die Herleitung im allgemeinen Fall läuft im Prinzip genauso, übersteigt allerdings etwas die mathematischen Kenntnisse.

$F(p)$ bzw die normierte Funktion:

$$\tilde{F}(p) := \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot F(p) \quad (61)$$

$$\int_{p=-\infty}^{\infty} |\tilde{F}(p)|^2 dp = 1 \quad (62)$$

Man erhält dann z.B. die folgenden Bilder der Funktionen $|\psi(x)|^2$ bzw $|\tilde{F}(p)|^2$:

1. $\sigma_x = 1m^{-1}$ und $p_0 = 3\frac{m^2}{s}$, $\hbar = 1$:

$$\tilde{F}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (8\pi)^{\frac{1}{4}} e^{-(p-3)^2}$$

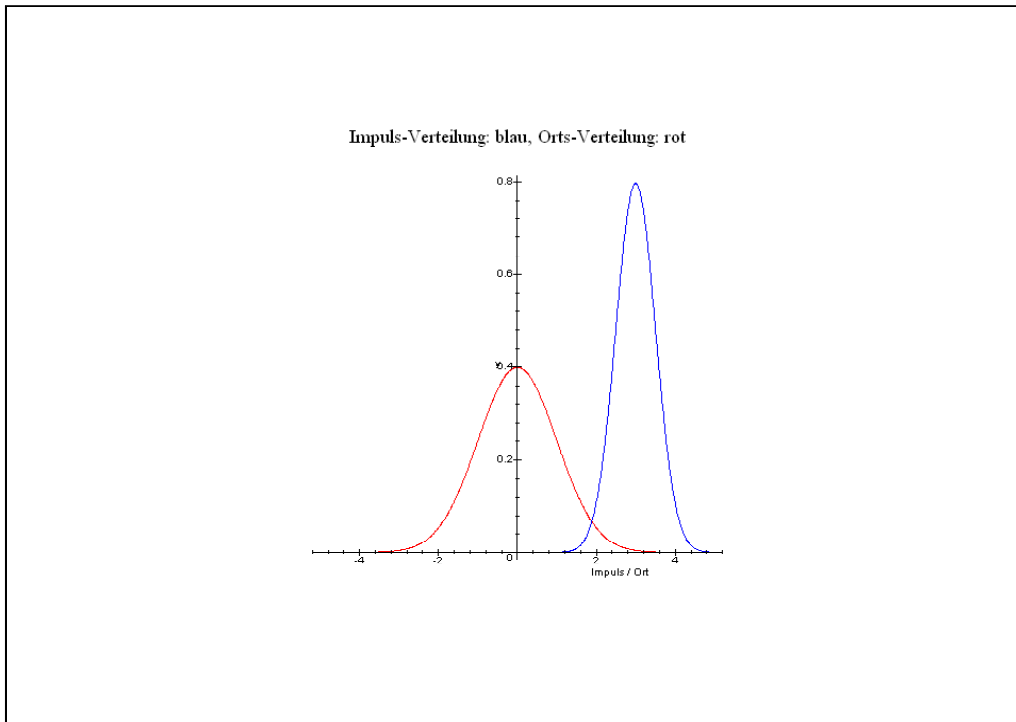


Figure 1: Orts- und Impulsverteilung: die Einheiten der x-Achse sind m bzw. kgm/s. Die Einheit der y-Achse ist jeweils die Wurzel aus der Wahrscheinlichkeitsdichte Ort bzw. Impuls.

Wie bereits aus der zweiten Vorlesung bekannt, führt die relativ breite Verteilung der möglichen Ortsmesswerte zu einer relativ schmalen Verteilung der möglichen Impulsmesswerte.

Im zweiten Beispiel soll nun eine relativ schmale Verteilung der möglichen Ortsmesswerte konstruiert werden, die dann vermöge der FOURIER-Transformation zu einer relativ schmalen Verteilung der möglichen Impulsmesswerte führt.

2. $\sigma_x = 2m^{-1}$ und $p_0 = 3\frac{m^2}{s}$, $\hbar = 1$:

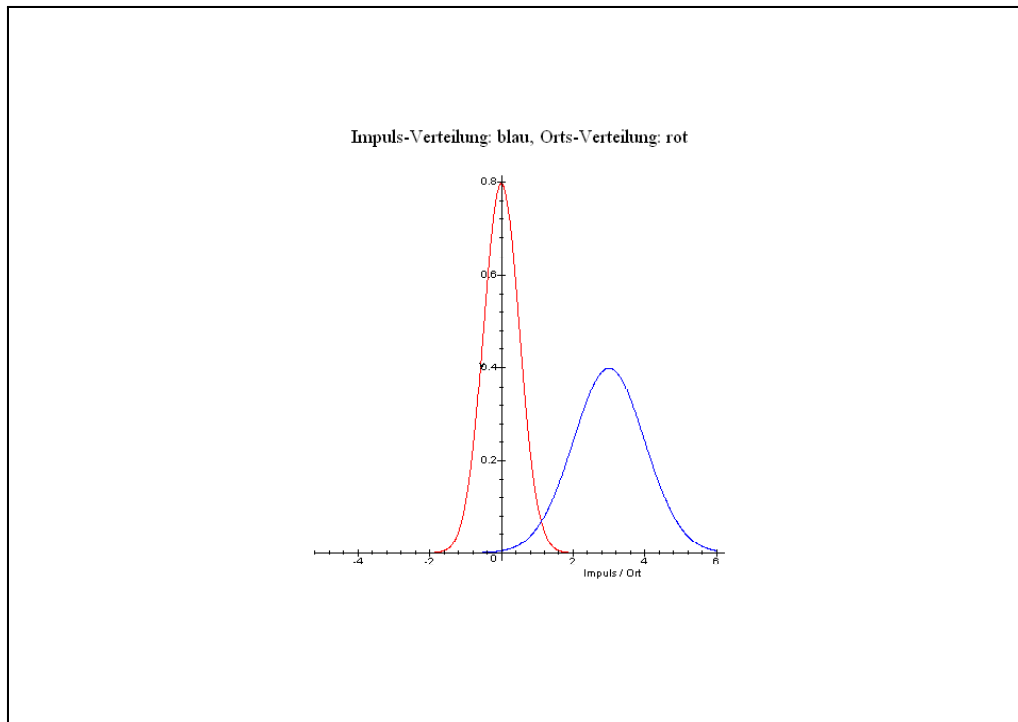


Figure 2: Orts- und Impulsverteilung: die Einheiten der x-Achse sind m bzw. kgm/s. Die Einheit der y-Achse ist jeweils die Wurzel aus der Wahrscheinlichkeitsdichte Ort bzw. Impuls.

Wir erhalten wieder das bereits bekannte Ergebnis²⁰: eine breite Ortsverteilung führt über die FOURIER-Transformation zu einer schmalen Impulsverteilung und umgekehrt. Dieses zunächst rein mathematische Ergebnis, das ganz allgemein in der FOURIER-Theorie bewiesen wird, führt in der Quantenmechanik zu einem speziellen Fall der HEISENBERG-Unschärferelation.

Wir berechnen nämlich nun für dieses freie Teilchen, beschrieben durch die Zustandsfunktion:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sigma_x}} \cdot e^{\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right)} \cdot e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}$$

²⁰Siehe Skript 2 zur *Quantenmechanik*.

die Unschärfe der Orts- und Impulsmessungen.

1. Zur Ortsmessung:

Erwartungswert des Ortes = Mittelwert der Ortsmessung:

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle_\psi &= \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot x \cdot \psi(x) \cdot dx \\
 &= \int_{x=-\infty}^{\infty} x \cdot |\psi(x)|^2 \cdot dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \cdot \int_{x=-\infty}^{\infty} x \cdot e^{\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right)} \cdot dx \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{63}$$

Das letzte Integral kann man mit Maple problemlos berechnen.

Erwartungswert von x^2 :

Mit Maple ist es ebenfalls kein Problem das folgende Integral zu berechnen:

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle_\psi &= \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot x^2 \cdot \psi(x) \cdot dx \\
 &= \int_{x=-\infty}^{\infty} x^2 \cdot |\psi(x)|^2 \cdot dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \cdot \int_{x=-\infty}^{\infty} x^2 \cdot e^{\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right)} \cdot dx \\
 &= \sigma_x^2
 \end{aligned} \tag{64}$$

Aus diesem Grund erhält man für die Unschärfe der Ortsmessung:

$$\delta_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle_\psi - \langle x \rangle_\psi^2} = \sqrt{\sigma_x^2} = \sigma_x \tag{65}$$

2. Zur Impulsmessung:

Erwartungswert des Impulses = Mittelwert der Impulsmessung:

Hier ist das folgende Integral zu berechnen:

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle_\psi &= \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \cdot dx \\
 &= \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2} - i\frac{p_0}{\hbar}x\right)} (-i\hbar) \cdot \left(-\frac{x}{2\sigma_x^2} + i\frac{p_0}{\hbar}\right) e^{\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2} + i\frac{p_0}{\hbar}x\right)} \cdot dx
 \end{aligned} \tag{66}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \cdot \left(\frac{i\hbar}{2\alpha}x + p_0\right) \cdot dx \\
&= \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot \left\{ \frac{i\hbar}{2\sigma_x^2} \cdot \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \cdot x \cdot dx + p_0 \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \cdot dx \right\} \\
&= \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot p_0 \cdot \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{\frac{1}{2}} \\
&= p_0
\end{aligned}$$

wie man mit Maple leicht berechnen kann²¹.

Erwartungswert von p^2 :

$$\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle_\psi &= \int_{x=-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \cdot (-i\hbar)^2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) \cdot dx \quad (67) \\
&= \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot (-\hbar^2) \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2} - i\frac{p_0}{\hbar}x\right)} \frac{\partial}{\partial x} \left(\left(-\frac{x}{2\sigma_x^2} + i\frac{p_0}{\hbar}\right) e^{\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2} + i\frac{p_0}{\hbar}x\right)} \right) \cdot dx \\
&= \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot (-\hbar^2) \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2} - i\frac{p_0}{\hbar}x\right)} e^{\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2} + i\frac{p_0}{\hbar}x\right)} \left[\left(-\frac{1}{2\sigma_x^2}\right) + \left(-\frac{x}{2\sigma_x^2} + i\frac{p_0}{\hbar}\right)^2 \right] \cdot dx \\
&= \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot (-\hbar^2) \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \cdot \left[\left(-\frac{1}{2\sigma_x^2}\right) + \left(-\frac{x}{2\sigma_x^2} + i\frac{p_0}{\hbar}\right)^2 \right] \cdot dx \\
&= \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot (-\hbar^2) \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \cdot \left(-\frac{1}{2\sigma_x^2}\right) \cdot dx \\
&\quad + \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot (-\hbar^2) \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \cdot \left(-\frac{x}{2\sigma_x^2} + i\frac{p_0}{\hbar}\right)^2 \cdot dx \\
&= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{\sigma_x^2} + \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot (-\hbar^2) \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \cdot \frac{x^2}{4\sigma_x^4} \cdot dx \\
&\quad + \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot (\hbar^2) \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \cdot x \frac{ip_0}{\sigma_x^2\hbar} \cdot dx + \left(2\sigma_x^2\pi\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot (\hbar^2) \int_{x=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} \cdot \left(\frac{p_0}{\hbar}\right)^2 \cdot dx \\
&= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{\sigma_x^2} - \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{\sigma_x^2} + 0 + p_0^2 \\
&= \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{\sigma_x^2} + p_0^2
\end{aligned}$$

Alle Integrale kann man ohne Probleme mit Maple berechnen, man erhält also schließlich für die Unschärfe des Impulses:

$$\delta_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle_\psi - \langle p \rangle_\psi^2} = \sqrt{\frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{\sigma_x^2} + p_0^2 - p_0^2} = \frac{\hbar}{2\sqrt{\sigma_x^2}} = \frac{\hbar}{2\sigma_x} \quad (68)$$

²¹ Siehe die Berechnung des Integrals im Programm "QMVorl3Pr1.mws".

Betrachten wir nun das Produkt der beiden Unschärfen, die wohlgermerkt für einen identischen Zeitpunkt berechnet wurden!! Man erhält:

$$\delta_x \cdot \delta_p = \sigma_x \cdot \frac{\hbar}{2\sigma_x} = \frac{\hbar}{2} \quad (69)$$

Dies ist ein Spezialfall der allgemeinen **HEISENBERG-Unschärferelation**:

$$\delta_x \cdot \delta_p \geq \hbar \quad (70)$$

Diese Beziehung bedeutet einen fundamentalen Unterschied zur klassischen Physik. Aus den N Messwerten ξ_i die bei einer Ortsmessung an einem physikalischen System, mathematisch beschrieben durch die Zustandsfunktion ψ , erhalten werden, ergibt sich die Breite oder Unschärfe δx durch:

$$(\delta_x)^2 = \langle x - \langle x \rangle_\psi \rangle_\psi = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\xi_i - \langle x \rangle_\psi)^2 \quad (71)$$

Sie bildet ein Maß dafür, wie stark die gemessenen Werte ξ_i vom Mittelwert $\langle x \rangle_\psi$ abweichen, also in welchem Bereich um den Mittelwert herum sie streuen. Wäre $\sigma_x = 0$, so würde man bei jeder Messung am System, beschrieben durch ψ immer den identischen Wert $x = \langle x \rangle_\psi$ messen. Dieser Wert wäre dann exakt, man würde nie eine Abweichung von diesem Wert messen. In diesem Sinne kann man δ_x als Unschärfe eines Messwertes auffassen, misst man am System den Ort eines Teilchens, so liegt dieser Wert in einem Streubereich $\pm \delta_x$ um den Mittelwert herum und ist kein exakter Wert. Die Unschärfe begrenzt die Genauigkeit, mit der z.B. ein Elektron in einem gebundenen Zustand beschrieben durch die Zustandsfunktion ψ , lokalisiert werden kann. **Die HEISENBERG-Unschärferelation sagt nun aus, dass es nicht möglich ist, durch eine Zustandsfunktion ein physikalisches System so zu beschreiben, dass die beiden Größen Ort und Impuls zur gleichen Zeit scharf definiert sind.** Damit sind wir an einem wichtigen und zugleich interessanten Punkt angekommen, der auch heute noch nicht geklärt ist.

Zum einen ist die Beschreibung eines physikalischen Systems durch die Zustands- oder Wellenfunktion über die SCHRÖDINGER-Gleichung eine experimentell eindeutig bestätigte Theorie, wie wir im Folgenden noch sehen werden. Auf der anderen Seite verlieren durch die Beschreibung eines physikalischen Systems durch eine Wellenfunktion so anschauliche Begriffe wie Ort und Impuls eines Teilchens ihre Bedeutung, da man keine exakten Werte für sie angeben kann, wie dies z.B. in der klassischen Physik möglich ist, insbesondere auch zum gleichen Zeitpunkt²². Diese Aussage reizt natürlich den menschlichen Verstand zum Widerspruch und führt zu verschiedenen Interpretationen, auf die wir am Ende der Vorlesung eingehen werden. Die beiden Grundpositionen sollen aber an dieser Stelle schon einmal vorgestellt werden:

1. Realistische Interpretation:

Ort und Impuls sind an sich wohl definiert, mit anderen Worten ein Teilchen besitzt

²² Dies ist sogar Voraussetzung für die Lösbarkeit der NEWTON-Bewegungsgleichung! Siehe hierzu aber auch die Gedanken BORNs im Skript zur 26. Vorlesung!

zu einem festen Zeitpunkt einen scharfen Impuls und einen scharfen, wohl definierten Ort. Es ist nur die unvermeidliche Störung des physikalischen Systems durch den Messvorgang²³, die verhindert, dass man an diese Werte genau misst. Die Wellenfunktion entspricht in dieser Sicht der Quantenmechanik einer unvollständigen, statistischen Beschreibung vieler Teilchen und führt daher nur zu Wahrscheinlichkeitsaussagen.

2. Kopenhagener Interpretation:

Diese insbesondere von BOHR, HEISENBERG und der Kopenhagener Schule vertretene Interpretation der Quantenmechanik vertritt die Auffassung das Begriffe wie Ort und Impuls im Bereich der Atomphysik nur als Erwartungswerte von hermiteschen Operatoren anwendbar sind. Es gibt in dieser Auffassung kein anschauliches Vorstellungsbild mehr z.B. für das Elektron im H-Atom. Die Zustandsfunktion ist in dieser Interpretation die gültige und vollständige Beschreibung *eines* solchen Elektrons.

Halten wir fest: In der Quantenmechanik beschreibt man physikalische Systeme durch eine Wellenfunktion. Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion ist durch die SCHRÖDINGER-Gleichung festgelegt.

Die Verbindung von $\psi(\mathbf{r}, t)$ mit Messgrößen ist wohldefiniert. Im allgemeinen kommt man nur zu Aussagen in der Form von Vorhersagen für die Häufigkeit von Messwerten an gleichartigen oder gleich präparierten Systemen²⁴. Daraus ergibt sich eine außerordentlich erfolgreiche Theorie wie wir im Folgenden noch erkennen werden.

²³Wir werden hierfür noch Beispiele angeben, siehe Skripte 26ff zur *Quantenmechanik*.

²⁴Anstatt die Messung an immer dem gleichen Atom durchzuführen, z.B. dem H-Atom im Grundzustand und es nach der Messung wieder in diesen durch die Messung zerstörten Zustand zu bringen, kann man auch sehr viele H-Atome im Grundzustand präparieren und die Messung an dieser Gesamtheit vornehmen.