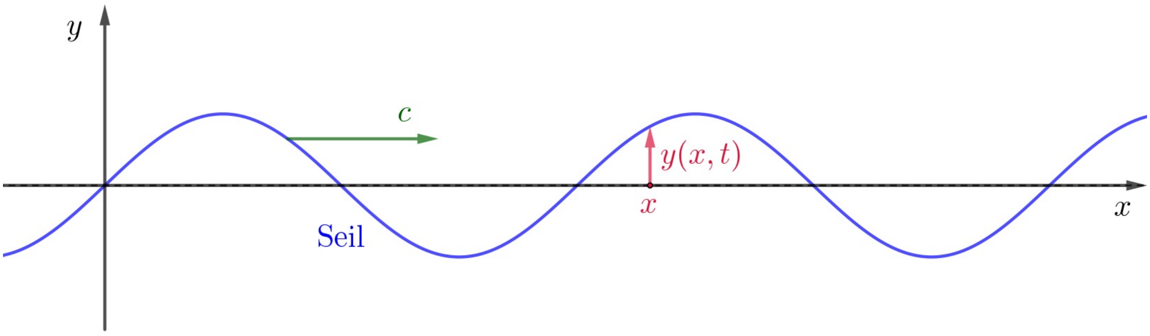
Ergänzungen zur Quantenphysik

Die Schrödinger-Gleichung für das freie Teilchen

Wie bestimmen wir die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ einer Materiewelle? In gewissem Sinn sind alle Arten von Wellen gleich. Für alle gibt es eine zugrunde liegende **Wellengleichung**, also eine oftmals aus anderen Prinzipien abgeleitete **Differentialgleichung (DGL)**, deren Lösung die Wellenfunktion sein muss. Betrachten wir zuerst zwei vertraute Fälle, nämlich die Wellen auf einem Seil und elektromagnetische Wellen.

1 Wellen auf einem Seil

Wir betrachten eine Welle mit seitlicher Auslenkung (= Transversalwelle) auf einem straff gespannten Seil:



Für eine solche Seilwelle lautet die Wellengleichung – eine partielle Differentialgleichung (DGL) in Ort x und Zeit t:

$$\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} = v^2 \, \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} \tag{1}$$

Dabei ist v die **Wellengeschwindigkeit**. Die Wellenfunktion ist die Lösung $y(x,t)$, welche die transversale (= seitliche) Amplitude y des Seils als Funktion von Ort x und Zeit t wiedergibt. Alle Wellengleichungen beruhen letzten Endes auf grundlegenden Gesetzen; auch diese Formulierung geht (nach einigen raffinierten Anpassungen) auf $F_{\text{res}} = ma$ zurück. Eine einfache sinusförmige Lösung dieser Wellengleichung ist die Wellenfunktion

$$y(x,t) = A\,\sin(kx - \omega t) \tag{2}$$

mit der **Wellenzahl**

$$k := \frac{2\pi}{\lambda} \tag{3}$$

und der **Kreisfrequenz**

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\, f \quad . \tag{4}$$

Dabei ist λ die **Wellenlänge**, T die **Periode** und f die **Frequenz**, wobei f und T Kehrwerte voneinander sind:

$$f = \frac{1}{T} \qquad \text{resp.} \qquad T = \frac{1}{f} \quad . \tag{5}$$

Indem wir die Lösung (2) in die Seilwellen-DGL (1) einsetzen, begreifen wir mehrere wichtige Aspekte:

- Erstens löst unsere Lösung (2) tatsächlich die Wellengleichung (1):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} &= \frac{\partial^2}{\partial t^2}\big(A\,\sin(kx-\omega t)\big) = -\omega A\cdot\frac{\partial}{\partial t}\big(\cos(kx-\omega t)\big) = -\omega^2 A\,\sin(kx-\omega t)\\
\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2}\big(A\,\sin(kx-\omega t)\big) = kA\cdot\frac{\partial}{\partial x}\big(\cos(kx-\omega t)\big) = -k^2 A\,\sin(kx-\omega t)\\
\Rightarrow\quad \frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial t^2} &\overset{!}{=} v^2\cdot\frac{\partial^2 y(x,t)}{\partial x^2} \qquad\Leftrightarrow\qquad \omega^2 = v^2 k^2
\end{aligned}$$

  Der Ausdruck $-A\sin(kx-\omega t)$ streicht sich komplett raus – und damit eben auch Ort x und Zeit t. Das bedeutet, dass die Gleichung an jeder beliebigen Stelle (x,t) stimmt, falls

- zweitens die Grössen v, k und ω so miteinander zusammenhängen, wie wir das eben herausgefunden haben, also:

$$\omega^2 = v^2 k^2 \quad\Leftrightarrow\quad v = \pm\frac{\omega}{k} \tag{6}$$

  Das $\pm$ sagt, dass sowohl Wellen mit positiver, als auch mit negativer Geschwindigkeit in x-Richtung möglich sind. Ausserdem enthält diese Gleichung die uns bereits vertraute grundlegende Beziehung zwischen Wellengeschwindigkeit, Wellenlänge und Frequenz:

$$v = \frac{\omega}{k} = \frac{2\pi\,f}{\frac{2\pi}{\lambda}} = \lambda\,f \tag{7}$$

  Typischerweise ist bei einem gespannten Seil die Wellengeschwindigkeit v eine Konstante, also für alle möglichen Wellen gleich. Dann sind auf diesem Seil durchaus verschiedene Wellenlängen λ möglich, je nachdem, mit welcher Frequenz f das Seil an einer Stelle angeregt wird: $\lambda = \frac{v}{f}$.

- Drittens verstehen wir, dass die Wellenamplitude A grundsätzlich keine Rolle spielt. Auch sie hat sich bei unserem Lösungsnachweis herausgestrichen. Diese Amplitude muss durch andere Umstände, die wir als **Rand**-, oder **Anfangsbedingungen** bezeichnen, festgelegt werden, also z.B. durch die Stärke der Anregung.

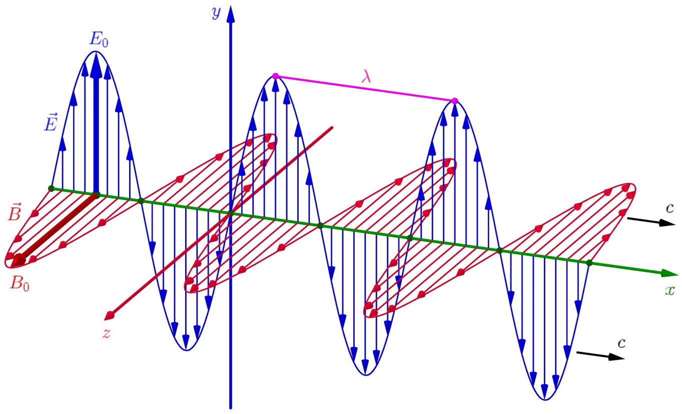
2 Elektromagnetische Wellen

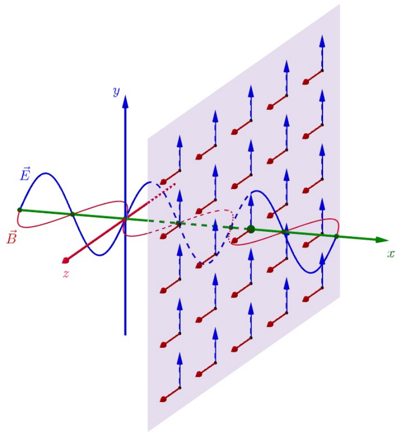
Die Grundgesetze der elektromagnetischen Phänomene sind die Maxwell'schen Gleichungen. Im Vakuum, in dem Ladungen und Ströme fehlen, lauten sie:

Maxwell-Gleichungen im Vakuum:

$$\begin{aligned}
\vec\nabla\cdot\vec E &= 0\\
\vec\nabla\cdot\vec B &= 0\\
\vec\nabla\times\vec E &= -\tfrac{\partial\vec B}{\partial t}\\
\vec\nabla\times\vec B &= \mu_0\varepsilon_0\,\tfrac{\partial\vec E}{\partial t}
\end{aligned} \tag{8}$$

Obwohl wir die Details überspringen, können diese Gleichungen, genau wie $F_{\text{res}} = ma$, zu Wellengleichungen – eine für das elektrische Feld $\vec E$ und eine für das magnetische Feld $\vec B$ – umgeordnet werden, die partielle Ableitungen nach dem Ort x und der Zeit t enthalten, also wieder partielle DGLs sind. Ein wesentlicher Unterschied zu den Seilwellen besteht darin, dass elektromagnetische Wellen von Natur aus zwei Anteile besitzen, nämlich eben $\vec E$ und $\vec B$. Die zugrunde liegende sinusförmige Lösung (Wellenfunktion) ist in diesem Fall eine ebene Welle. Per Definition bewegt sich eine **ebene Welle** in eine Richtung und hat eine konstante Amplitude – sie verbreitert sich nicht. Die folgenden beiden Abbildungen haben wir bereits früher gesehen. Sie zeigen eine ebene Welle, die sich in x-Richtung ausbreitet.





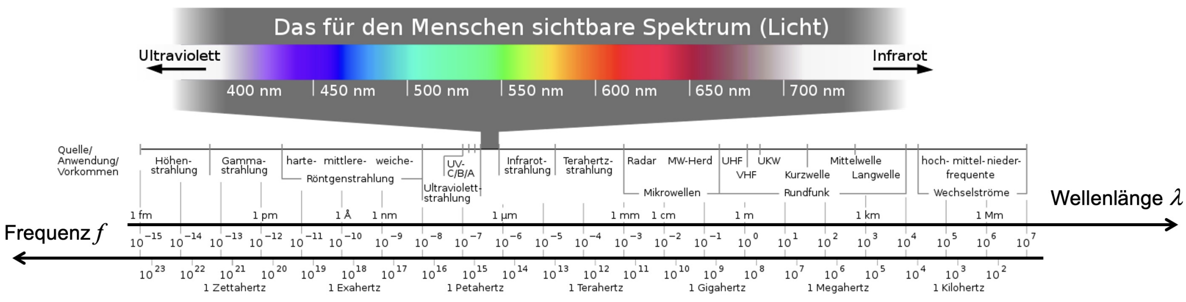
Die Lösungen der Maxwell'schen Gleichungen, die diese elektromagnetische Welle längs der x-Richtung beschreiben, lauten:

$$\left.\begin{aligned} \vec{E}(x,t) &= E_0 \sin(kx - \omega t)\,\hat{y} \\ \vec{B}(x,t) &= B_0 \sin(kx - \omega t)\,\hat{z} \end{aligned}\right\} \quad \text{mit} \quad c = \frac{\omega}{k} = \lambda f \quad \text{und} \quad B_0 = \frac{E_0}{c} \tag{9}$$

Hier stehen $\hat{y}$ und $\hat{z}$ für Einheitsvektoren in y- resp. z-Richtung. Wir sehen in der Beschreibung der elektromagnetischen Wellen grosse Ähnlichkeiten mit den Seilwellen – es werden dieselben Grössen λ, f, k, ω benutzt, weil dies halt der Formalismus einer laufenden Sinusfunktion ist. Insbesondere ergibt sich wieder die bekannte Wellenbeziehung $v = \lambda f$, wobei die Ausbreitungsgeschwindigkeit v im Falle elektromagnetischer Wellen eben die Lichtgeschwindigkeit c ist. Da die Lcihtgeschwindigkeit für alle elektromagnetischen Wellen gleich gross ist, eröffnet sich hier das ganze Spektrum möglicher elektromagnetischer Wellen (siehe Bild unten). Im Prinzip sind beliebige Frequenzen f möglich, wobei die zugehörige Wellenlänge dann durch $\lambda = \frac{c}{f}$ gegeben ist.

Es ist anzumerken, dass die Amplituden von elektrischem und magnetischem Feld nicht unabhängig voneinander sind. Stattdessen gilt: $B_0 = \frac{E_0}{c}$.

Das elektromagnetische Spektrum



Wellenbeziehung $\boxed{c = \lambda \cdot f}$

c = Lichtgeschwindigkeit (299‘792‘458 m/s)

λ = Wellenlänge (m)

f = Frequenz (Hz = 1/s)

3 Materiewellen

Die Wellengleichung, der die Materiewellen gehorchen, ist die **Schrödinger-Gleichung**. In diesem Kapitel befassen wir uns nur mit dem Spezialfall freier Teilchen und verschieben die Auswirkungen äußerer Kräfte auf spätere Betrachtungen. In Abwesenheit äußerer Kräfte lautet die Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen:

Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen:
$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} \tag{10}$$

Diese Gleichung kann Anfängern im Bereich der Quantenmechanik aus zwei Gründen auf den Magen schlagen: Weil zum einen ihre Form nicht intuitiv erkennbar ist, müssen wir hoffen, dass wir sie aus grundlegenderen Prinzipien ableiten können. Allerdings gibt es schlicht keine grundlegenderen physikalischen Prinzipien, auf denen sie aufbaut. Dass sie geradezu den Charakter eines "Gesetzes" oder "Axioms" hat, beruht auf ihren richtigen Vorhersagen – etwa die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zu einem Zeitpunkt t an einem Ort x anzutreffen. Obwohl wir sie nicht herleiten können, lässt sich argumentieren, dass sie zumindest eine einleuchtende Grundlage hat.

Zum anderen ist die Schrödinger-Gleichung **komplex** und enthält die **imaginare Einheit** i, also $\sqrt{-1}$. Man könnte fälschlicherweise auf den Gedanken kommen, dass eine Materiewelle nicht "real" sei. Unglücklicherweise scheint dies genau unserer früheren Aussage zu entsprechen: Die Wellenfunktion ist nicht direkt beobachtbar. (Warum sollte sie das, wenn sie sowieso nicht reell ist?) Doch das i ist keineswegs da, weil Materiewellen irreal wären, sondern weil sie sich nicht durch eine einzige reelle Funktion beschreiben lassen. Wie elektromagnetische Wellen besitzen sie von Natur aus zwei Teile. Durch eine komplexe Funktion, die zweimal so viel Informationen tragen kann wie eine reelle, können wir sie beide gleichzeitig behandeln. Bei der Untersuchung von elektromagnetischen Wellen könnten wir $\vec{E}$ und $\vec{B}$ als eine komplexe Einheit behandeln, wenn wir noch den Faktor i einfügen würden, ohne dadurch irgendeines der Felder "irreal" zu machen. Wir unterlassen dies, weil $\vec{E}$ und $\vec{B}$ ganz unterschiedliche Aussagen machen; deshalb wollen wir sie getrennt halten. Für Materiewellen haben wir keinen vergleichbaren Grund, sie in zwei Teile zu separieren, daher verwenden wir eine einzelne komplexe Funktion. Das lässt sich wie folgt schreiben:

$$\Psi(x,t) = A(x,t) + \mathrm{i} \cdot B(x,t) \tag{11}$$

Dabei sind $A(x,t)$ und $B(x,t)$ nun beides reelle Funktionen von Ort und Zeit, die wir als **Real**- und **Imaginärteil** von $\Psi(x,t)$ bezeichnen. Wir schreiben:

Realteil: $A(x,t) = \mathrm{Re}\,\Psi(x,t)$ Imaginärteil: $B(x,t) = \mathrm{Im}\,\Psi(x,t)$ (12)

Somit gilt:
$$\Psi(x,t) = \mathrm{Re}\,\Psi(x,t) + \mathrm{i} \cdot \mathrm{Im}\,\Psi(x,t) \tag{13}$$

Die Wellenfunktion zu einer Materiewelle enthält also zwei reelle Funktionen von Ort und Zeit. Dass wir dafür nur $\Psi(x,t)$ ist aber keine Physik, sondern einfach nur eine Frage der mathematischen Bequemlichkeit.

Eine komplexe Wellenfunktion mag bequem sein, aber können wir sie *physikalisch interpretieren*? Auch auf die Gefahr hin, frech zu klingen: Warum *sollten* wir sie interpretieren? Es gibt keinen Grund dafür, da die Wellenfunktion selbst nicht physikalisch beobachtet werden kann. Der experimentellen Prüfung ist lediglich das "Quadrat" der Wellenfunktion zugänglich, also eine reelle, nichtnegative Größe: die Wahrscheinlichkeitsdichte.

4 Wahrscheinlichkeitsdichte

Wie wir festgestellt haben, gilt für alle Phänomene, dass die Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen zu beobachten, proportional zum Quadrat der Wellenamplitude ist. Was bedeutet das aber, wenn die Welle zwei Teile aufweist, etwa ein $\vec{E}$ und ein $\vec{B}$ oder den realen und imaginären Teil von $\Psi(x,t)$? Bei elektromagnetischen Wellen zeigt das Experiment, dass die Wahrscheinlichkeit proportional zu $E^2 + (cB)^2$? ist, und das ist keineswegs zufällig proportional zur elektromagnetischen Intensität. Die Addition der Quadrate ist daher ganz natürlich.

Die Experimente zeigen, dass dies auch für Materiewellen gilt. Addiert werden die Quadrate des reellen und das imaginären Anteils:

$$\big(\mathrm{Re}\,\Psi(x,t)\big)^2 + \big(\mathrm{Im}\,\Psi(x,t)\big)^2 = |\,\Psi(x,t)|^2$$

Wenn wir also vom "Quadrat der Wellenfunktion" sprechen, so handelt es sich um das *Betragsquadrat der komplexen Wellenfunktion* $|\,\Psi(x,t)|^2$, das sich aus der Summe der Quadrate von Real- und Imaginärteil der komplexen Wellenfunktion ergibt. Oftmals werden wir es allerdings mit Wellenfunktionen zu tun haben, deren Imaginärteil gleich null ist. Dann besteht $\Psi(x,t)$ nur aus einem Realteil und $|\,\Psi(x,t)|^2$ ist das Quadrat einer einzigen reellen Funktion $A(x,t) = \mathrm{Re}\,\Psi(x,t)$. Wichtig ist: $|\,\Psi(x,t)|^2$ ist eine reelle, positive Funktion in den Variablen (x,t). Jetzt müssen wir uns noch genauer mit ihrer Interpretation resp. ihrer weiteren Verwendung auseinandersetzen.

Bislang haben wir vorsichtigerweise gesagt, dass die Wahrscheinlichkeit und das Quadrat der Amplitude der Wellenfunktion *proportional zueinander* sind. Nehmen wir an, wir suchen das Teilchen in einem Gebiet um einen bestimmten Punkt x herum, das die Ausdehnung δ besitzt. Für eine gegebene Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ gibt es eine bestimmte Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zum Zeitpunkt t dort zu finden. Ist δ aber so klein, dass die Amplitude der Wellenfunktion in diesem Gebiet im Wesentlichen konstant ist, dann muss die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem Gebiet der Größe 2δ zu finden, doppelt so groß sein. Daher muss das Quadrat der Amplitude der Wellenfunktion auf eine *Wahrscheinlichkeit pro Längeneinheit* führen. In drei Dimensionen entspricht dies der *Wahrscheinlichkeit pro Einheitsvolumen*. Der übliche Ausdruck für eine Wahrscheinlichkeit pro Längen- oder Volumeneinheit lautet **Wahrscheinlichkeitsdichte**. Es gilt also:

$$\textbf{Wahrscheinlichkeitsdichte} = |\,\Psi(x,t)|^2 \tag{14}$$

Vielleicht noch greifbarer werden diese Aussagen und dieser neue Begriff, wenn wir uns anschauen, wie wir damit nun beispielsweise die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens in einem bestimmten Gebiet, z.B. zwischen den beiden Stellen x_1 und x_2, berechnen: Die infinitesimale Wahrscheinlichlichkeit $\mathrm{d}p(x,t)$, das Teilchen zum Zeitpunkt t in einem infinitesimalen Bereich $\mathrm{d}x$ bei der Stelle x anzutreffen, beträgt gemäss den Überlegungen oben:

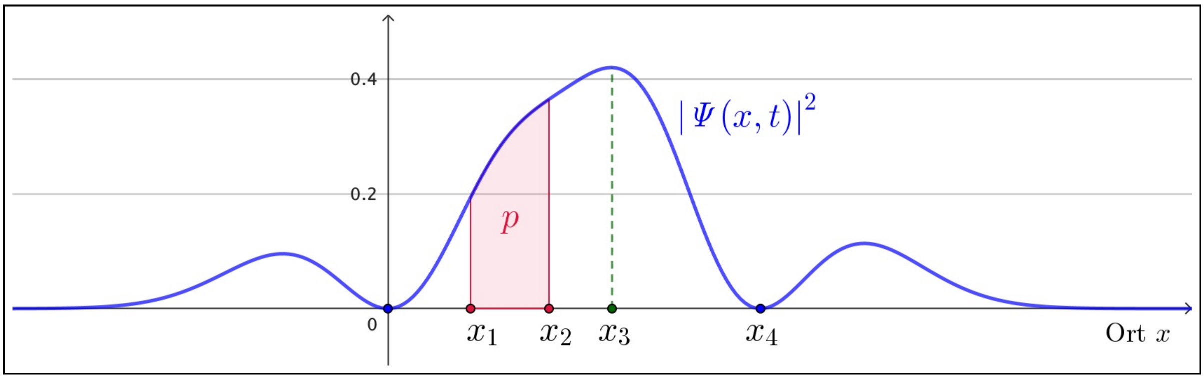
$$\mathrm{d}p(x,t) = |\,\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x \tag{15}$$

Diese infinitesimale Wahrscheinlichkeit $\mathrm{d}p(x,t)$ ist, wie gesagt, proportional zum infinitesimalen Bereich $\mathrm{d}x$ – im unendlich Kleinen muss das so sein!

Um nun die endliche Wahrscheinlichkeit $p(x_1,x_2,t)$ zu berechnen, das Teilchen zum Zeitpunkt t zwischen den Stellen x_1 und x_2 anzutreffen, müssen wir über alle diese infinitesimalen Wahrscheinlichkeiten summieren, d.h., es muss über alle diese Wahrscheinlichkeiten *integriert* werden:

$$p(x_1,x_2,t) = \int_{[x_1;x_2]} \mathrm{d}p(x,t) = \int_{x_1}^{x_2} |\,\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x \tag{16}$$

Zeichnen wir $|\Psi(x,t)|^2$ zu einem bestimmten Zeitpunkt t als Funktion von x auf, wie wir das seit jeher machen, so wird klar: Die Wahrscheinlichkeit p, das Teilchen zum Zeitpunkt t zwischen den Stellen x_1 und x_2 anzutreffen, entspricht der Fläche unter dem Graphen zwischen x_1 und x_2:



Natürlich muss die Fläche unter dem gesamten Funktionsgraphen den Wert 1 besitzen, denn irgendwo muss das Teilchen ja sein. Die Gesamtwahrscheinlichkeit muss gleich 1 sein. Später werden wir sagen, die Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ muss *normiert* sein.

Weiter bezeichnet x_3 eine Stelle, in dessen Umgebung wir das Teilchen mit hoher Wahrscheinlichkeit antreffen, während es bei $x=0$ und an der Stelle x_4 derzeit gar nicht aufgefunden wird.

5 Die ebene Welle

Befassen wir uns nun mit der Grundlage der Schrödinger-Gleichung für freie Teilchen, indem wir die allgemeinste Lösung herleiten. Eine Lösung, die einer ebenen Welle entspricht, enthält die komplexe Exponentialunktion

$$\Psi(x,t) = A\, e^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} \quad , \tag{17}$$

in der die Amplitude A eine Konstante darstellt. Mittels der **Euler'schen Formel**

$$e^{ix} = \cos x + \mathrm{i}\,\sin x \tag{18}$$

lässt sich $\Psi(x,t)$ auch ausführlicher und zunächst vielleicht verständlicher schreiben in der Form:

$$\Psi(x,t) = A\, e^{\mathrm{i}(kx-\omega t)} = A\cos(kx-\omega t) + \mathrm{i}\cdot A\sin(kx-\omega t) \tag{19}$$

Wie wir in den Übungen zeigen werden, handelt es sich bei (17) tatsächlich um eine Lösung der Schrödinger-Gleichung (10). Das stimmt aber nur, wenn zusätzlich gilt:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \tag{20}$$

Die Gültigkeit dieser Gleichung ist der Schlüssel dafür zu erkennen, wie die Schrödinger'sche *Wellen*gleichung mit der Klassischen Physik der *Teilchen* verknüpft ist. Wir hoffen, dass sie nicht den grundlegenden Beziehungen zwischen Welle und Teilchen $p=\hbar k$ und $E=\hbar\omega$ widerspricht. Was geschieht, wenn wir diese Beziehungen in (20) einsetzen?

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \qquad \Rightarrow \qquad \frac{p^2}{2m} = E \tag{21}$$

Da klassisch $E_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ gilt, besagt dies schlicht, dass die kinetische Energie eines Teilchens seiner Gesamtenergie entsprechen muss. Dies entspricht der klassischen Beschreibung, denn ein freies Teilchen besitzt keine potenzielle Energie. *Daher stimmt die Schrödinger-Gleichung mit der klassischen Auffassung der Energie überein.*, was uns schon einigermassen beruhigt.

6 Veranschaulichung und Interpretation der ebenen Welle

Wie (19) zeigt, besteht die komplexe Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ aus zwei Teilen, die um eine Viertelschwingung außer Phase sind – dann das ist die relative Lage einer Sinus- und einer Cosinusfunktion mit gleichem Argument, sie sind um eine Viertelperiode verschoben zueinander.

Obwohl die Wellenfunktion physikalisch nicht zu beobachten ist, bietet die nachfolgende Abbildung einen Einblick in die mathematischen Eigenschaften einer ebenen Welle. Der Realteil $\mathrm{Re}\,\Psi$ ist ein Cosinus und wird in eine Richtung senkrecht zur Ausbreitungsrichtung x abgetragen, der Imaginärteil $\mathrm{Im}\,\Psi$ ist ein Sinus und wird in eine Richtung senkrecht zur Ausbreitungsrichtung und zum Realteil abgetragen. Beide Anteile sind gerade so außer Phase, nämlich eben um $90°$, dass ihr Betrag konstant $(\mathrm{Re}\,\Psi)^2 + (\mathrm{Im}\,\Psi)^2$ *konstant* ist – er verändert sich weder im Ort noch in der Zeit. Im Bild bleibt der Abstand des spiralförmig kreisenden Punktes von der x-Achse immer gleich. Die direkte Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte stimmt damit überein:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \ldots = A^2\big(\cos^2(kx-\omega t) + \sin^2(kx-\omega t)\big) = A^2 = \mathrm{konst.} \tag{22}$$

Es gilt also: $|\Psi(x,t)| = A$. (Die ausführliche Berechnung verschieben wir auf die Übungen.)

Was bedeutet es, dass die Wahrscheinlichkeit pro Längeneinheit konstant ist? Es besagt, dass *ein durch eine ebene Welle repräsentiertes Teilchen*, nach dem wir suchen, *überall mit gleicher Wahrscheinlichkeit angetroffen werden kann*.

Ganz offensichtlich ist eine ebene Welle nicht allzu realistisch, aber sie ist dennoch ganz nützlich. In der Optik benutzen wir ebene Lichtwellen, da sie oft eine hinreichende *Näherung* für die tatsächliche Welle darstellen. Das gleiche gilt bei Materiewellen. Aber die Bedeutung der ebenen Wellen geht viel weiter, denn eine allgemeine Welle kann rechnerisch als Summe vieler ebener Wellen dargestellt werden – sie sind leicht zu analysierende “Bausteine”. Wir werden verschiedentlich darauf zurückgreifen.