

# Kapitel 2

## Die Schrödinger-Gleichung

Ausgearbeitet von Udo Klein

### 2.1 Form und Interpretation

#### 2.1.1 Einleitung

In Kapitel 1 werden die scheinbar unüberwindbaren Widersprüche zur klassischen Physik aufgezeigt, die sich aus den dort beschriebenen Experimenten ergeben. So hat das Licht einerseits Welleneigenschaft (z.B. die Interferenzfähigkeit), andererseits Partikeleigenschaften (z.B. im Compton-Effekt, der sich mit den Stoßgesetzen erklären lässt). Dieser Dualismus des Lichtes ist mit der klassischen Physik unvereinbar.

Es gibt nun umgekehrt auch solche Experimente, die zeigen, dass ein ursprünglich als Materie gedeutetes physikalisches Objekt (z.B. das Elektron) als Welle in Erscheinung treten kann. Nicht einzusehen ist, dass dieser Dualismus nur bei bestimmten Materieteilchen vorhanden ist. Aus diesem Grunde formulierte De Broglie die Forderung, dass jedem mit Masse behafteten Partikel eine Welle ("Materiewelle") zugeordnet sein muss. Die fundamentale Beziehung zwischen diesen beiden Erscheinungsformen ist die De Broglie Beziehung:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

wobei  $\vec{p}$  der Impuls des Teilchens und  $\vec{k}$  der Wellenvektor der dem Teilchen zugeordnete Materiewelle ist. Die Haupteigenschaft der Materiewelle erhält man aus der Analogie zur Optik. Wir werden erwarten, dass die Intensität der Materiewelle (in der Optik: Welle) an einem Punkt die Wahrscheinlichkeit angibt, das Teilchen (in der Optik: Photon) in diesem Punkt zu finden. Die einfachste Deutung des Wellen-Korpuskel Dualismus wird also die statistische Interpretation sein. Genau dieser Gedanke wird in der Quantenmechanik verfolgt.

Ein erstes Ziel ist nun, eine Funktion ("Wellenfunktion") aufzustellen, die den dynamischen Zustand eines Systems vollkommen beschreibt, d.h. alle Informationen beinhaltet, die zur Bestimmung des Zustandes des Systems an einem bestimmten Ort zu einer bestimmten Zeit notwendig sind. Das bedeutet aber nichts anderes, als eine Ausbreitungsgleichung für die Wellenfunktion  $\psi$  zu suchen. Diese Gleichung ist die Schrödinger-Gleichung in der Quantenmechanik.

Da der Übergang von der klassischen Mechanik (KM) zur Quantenmechanik (QM) eine Verallgemeinerung (nicht eine Spezialisierung) darstellt, kann die Quantenmechanik daher nicht deduktiv hergeleitet werden. Natürlich ist der umgekehrte Weg möglich: Aus der Quantenmechanik kann durch gewisse Spezialisierungen die klassische Mechanik gewonnen werden (Korrespondenzprinzip). Wir wollen nun keine Pseudoableitung der Quantenmechanik liefern, sondern gewisse Rezepte angeben, die den Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik bewerkstelligen. Die einzige Berechtigung für dieses Vorgehen liegt in der Übereinstimmung von experimentellen Ergebnissen mit den aus der Quantenmechanik erhaltenen Voraussagen.

$$QM \not\equiv KM$$

Die Quantenmechanik ist speziell eine Verallgemeinerung des Hamilton-Formalismus der klassischen Mechanik. Deshalb soll hier eine kurze Rekapitulation dieser Theorie gebracht werden:

a) Zeitunabhängige Hamiltonfunktion

Gegeben sei ein Teilchen mit den generalisierten Orts- und Impulskoordinaten  $q_i$  und  $p_i$ . Ist das Potential unabhängig von den generalisierten Geschwindigkeiten, so ist die Lagrange-Funktion definiert durch

$$L(q_i, \dot{q}_i) = T(q_i, \dot{q}_i) - U(q_i)$$

Die zeitunabhängige Hamilton-Funktion ist mit Hilfe von  $L$  definiert:

$$H = \sum_j \dot{q}_j p_j - L$$

Mit der Definition der generalisierten Impulse:

$$p_j = \frac{\partial L(q_i, \dot{q}_i)}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial T(\dot{q}_i)}{\partial \dot{q}_j} \quad (\text{letzteres wegen } \frac{\partial U}{\partial \dot{q}_j} = 0)$$

und der Tatsache, dass die kinetische Energie  $T$  eine homogene quadratische Funktion der  $\dot{q}_j$  ist, wenn die Zwangsbedingungen unseres Systems zeitunabhängig sind, ergibt sich  $H$  zu<sup>1</sup>:

$$H = \sum_j \dot{q}_j \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} - L = 2T - (T - U) = T + U$$

Die zeitunabhängige Hamilton-Funktion lautet also:

$$H(p_i, q_i) = T(p_i, q_i) + U(q_i)$$

$H$  ist also die Gesamtenergie des Systems. Ort und Impuls sind konjugierte Variable, was sich in den Hamiltonschen Gleichungen manifestiert:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H(p, q)}{\partial p_i}; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}; \quad i = 1, \dots, s$$

Die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen können auch mit dem für die klassische Mechanik wichtigen Poisson-Klammern formuliert werden. Diese sind definiert durch:

$$\{u, v\} = \sum_k \left( \frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial u}{\partial p_k} \frac{\partial v}{\partial q_k} \right)$$

wobei  $u$  und  $v$  Funktionen von den Koordinaten sind. Die Fundamentalklammern der klassischen Mechanik lauten:

$$\begin{aligned} \{q_i, p_j\} &= \delta_{ij}; & \{p_i, q_j\} &= -\delta_{ij} \\ \{q_i, q_j\} &= \{p_i, p_j\} = 0 \end{aligned}$$

b) Zeitabhängige Hamiltonfunktion

In diesem Fall definieren wir eine neue Funktion  $\tilde{H}$  mit

$$\tilde{H} = H(q, p, t) - E(t) = 0$$

$-E = p_0$  und  $q_0 = t$  sind ebenfalls konjugierte Variablen. Es gilt nun:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \tilde{H}(p, q)}{\partial p_i}; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q_i}; \quad i = 0, \dots, s$$

---

<sup>1</sup>Siehe: H. Goldstein, Kl. Mechanik, Akademische-Verlags-Gesellschaft, Stuttgart, p. 58f

## 2.1.2 Übergang zur Quantenmechanik

Wir geben nun die Rezepte an, wie aus den klassischen Koordinaten die quantenmechanischen Darstellungen gewonnen werden können. Die klassischen Koordinaten werden bei dem Übergang in Operatoren überführt. Man unterscheidet die Orts- und Impulsdarstellung, je nachdem ob die Impuls- oder Ortskoordinate durch einen Operator ersetzt wird. Beide Darstellungen sind gleichberechtigt, d.h. für ein Problem beliebig wählbar.

**Rezept 1:**

$$\begin{aligned} \text{Ortsdarstellung:} \quad & (q_i, p_i) \longrightarrow \left( q_i, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) \\ \text{Impulsdarstellung:} \quad & (q_i, p_i) \longrightarrow \left( -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_i}, p_i \right) \end{aligned}$$

Bezeichnen wir nun Operatoren durch ein aufgesetztes Dach ( $\hat{\phantom{x}}$ ), dann kann man Rezept 1 umschreiben in:

$$(q_i, p_i) \longrightarrow (\hat{q}_i, \hat{p}_i)$$

wobei in der Ortsdarstellung:  $\hat{q}_i = q_i$  und  $\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i}$  und in der Impulsdarstellung:  $\hat{q}_i = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_i}$  und  $\hat{p}_i = p_i$ .

Bevor wir uns nun Rezept 2 zuwenden, soll diese Transformation diskutiert werden:

- α) Der Übergang von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik ist nicht eindeutig. Dies beruht darauf, dass das Produkt von Operatoren (im Gegensatz zum Produkt von Koordinaten) nicht kommutativ ist, d.h.:

$$\text{i.a. gilt: } \hat{L}\hat{M} \neq \hat{M}\hat{L} \Leftrightarrow \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L} \neq 0$$

Definieren wir die Kommutatorklammern  $[\hat{L}, \hat{M}]$  durch  $[\hat{L}, \hat{M}] = \hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L}$ , so ist die obige Aussage äquivalent zu:

$$\text{i.a. gilt: } [\hat{L}, \hat{M}] \neq 0$$

Beispiel für die Nichtkommutativität von Operatoren:

$$\begin{aligned} \hat{L} &= \frac{\partial}{\partial x}; & \hat{M} &= x \\ \Rightarrow [\hat{L}, \hat{M}] &= \frac{\partial}{\partial x} x - x \frac{\partial}{\partial x} = x \frac{\partial}{\partial x} + 1 - x \frac{\partial}{\partial x} = 1 \end{aligned}$$

Beispiel für die Nichteindeutigkeit des Übergangs von der klassischen zur Quantenmechanik: Die kinetische Energie eines klassischen Problems betrage

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{q}} p q p \frac{1}{\sqrt{q}}$$

Wenden wir die Ortsdarstellung von Rezept 1 an, so wird überführt:

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{2m} &\longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} & \text{und} \\ \frac{1}{2m} \frac{1}{\sqrt{q}} p q p \frac{1}{\sqrt{q}} &\longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{\hbar^2}{8mq^2} \end{aligned}$$

Wir sehen, dass identische Ausdrücke der klassischen Mechanik zu verschiedenen Ausdrücken der Quantenmechanik führen können, eben weil Operatoren nicht vertauschen.

β) Als zweiter wesentlicher Punkt ist zu erwähnen, dass die Anwendung von Rezept 1 nur dann zum Ziel führt, wenn die klassischen Koordinaten kartesisch sind. Das bedeutet: ein nicht in kartesischen Koordinaten vorliegendes Problem der klassischen Mechanik muss erst in kartesische Koordinaten transformiert werden, bevor der Übergang zur Quantenmechanik mittels Rezept 1 erfolgen kann.<sup>2</sup>

**Rezept 2:**

Wenn  $\tilde{H}(q, p)$  die in der Einleitung erwähnte Hamiltonfunktion ist, dann geht diese ja mit Rezept 1 über in:

$$\begin{aligned} \tilde{H}(q, p) &\longrightarrow \tilde{H}\left(q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q}\right) && \text{in der Ortsdarstellung} \\ \tilde{H}(q, p) &\longrightarrow \tilde{H}\left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}, p\right) && \text{in der Impulsdarstellung} \end{aligned}$$

Das Rezept 2 zur Bildung der Schrödinger-Gleichung lautet nun:<sup>3</sup>

$$\begin{aligned} \tilde{H}(q, \hat{p})\psi(q) &= 0 && \text{in der Ortsdarstellung} \\ \tilde{H}(\hat{q}, p)\psi(p) &= 0 && \text{in der Impulsdarstellung} \end{aligned}$$

Damit sind die Ersetzungen angegeben, die uns in den meisten Fällen den Übergang von der klassischen zur Quantenmechanik gestatten. Wegen ihrer fundamentalen Bedeutung der Vertauschungsrelationen für die Quantenmechanik (entsprechend den Poisson-Klammern in der klassischen Mechanik) wollen wir zunächst diese mit Hilfe der obigen Vorschriften auswerten (wir wählen die Ortsdarstellung):

$$\begin{aligned} [\hat{q}_i, \hat{p}_k] &= \hat{q}_i \hat{p}_k - \hat{p}_k \hat{q}_i = q_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} q_i \\ &= q_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_k} - \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial q_i}{\partial q_k} + q_i \frac{\partial}{\partial q_k} \right) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial q_i}{\partial q_k} = i\hbar \delta_{i,k} \end{aligned}$$

In der Impulsdarstellung ergibt sich das gleiche Ergebnis:

$$[q_i, p_k] = i\hbar \delta_{i,k}$$

Diese Vertauschungsrelationen bilden das Fundament der Quantenmechanik. Baut man die Quantenmechanik axiomatisch auf, so hat man obige Beziehung als Axiom zu setzen. Die Analogie zur klassischen Mechanik wird hier sehr deutlich. Es galt dort:  $\{p_i, q_k\} = \delta_{ik}$ .

### 2.1.3 Schrödinger-Gleichung

Zur Bildung der Schrödinger-Gleichung nach Vorschrift 2 benötigen wir noch folgende Übergänge (bekannt ist:  $q_0 \equiv t; p_0 \equiv -E$ ):

$$\begin{aligned} \text{Impulsdarstellung:} \quad q_0 = t &\longrightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_0} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial E}; \quad p_0 = -E \\ \text{Ortsdarstellung:} \quad p_0 = -E &\longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t}; \quad q_0 = t \\ \Rightarrow \quad E &\longrightarrow -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \end{aligned}$$

Es wird nun die Schrödinger-Gleichung in Ortsdarstellung und kartesischen Koordinaten für ein Teilchen im Potential  $U(\vec{r}, t)$  nach Vorschrift 2 abgeleitet.

<sup>2</sup>Ein Beispiel hierzu findet man in Messiah, QM I, p. 69.

<sup>3</sup>Das hier vorkommende  $\psi$  ist die schon erwähnte Wellen- oder Zustandsfunktion.

$$\begin{aligned}\tilde{H}(p, q) &= \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}, t) - E(t) \\ \tilde{H}(\hat{p}, q) &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\vec{r}, t) - E(t)\end{aligned}$$

wobei

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 = -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\hbar^2 \Delta = -\hbar^2 \vec{\nabla}^2$$

ist

$$\Rightarrow \tilde{H}(\hat{p}, q) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) - E(t)$$

mit  $\tilde{H}(\hat{p}, q)\psi(\hat{q}) = 0$  ergibt sich dann die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

oder kurz:

$$H\psi = E\psi$$

Im zeitabhängigen Fall, wo die Energie  $E$  und das Potential zeitabhängig sind, ersetzen wir  $E(t)$  in der Ortsdarstellung durch den Operator  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ . Damit lautet die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

oder auch in Kurzfassung:

$$H\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

Die Schrödinger-Gleichung ist also eine partielle Differentialgleichung zur Bestimmung der Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$ . Bezüglich der Zeit ist die Schrödinger-Gleichung ersten Grades und bezüglich des Ortes vom Grade 2. Diese Asymmetrie ist dafür verantwortlich, dass die Gleichung in dieser Form für relativistische Probleme nicht relevant sein kann.

Die Wellenfunktion  $\psi(\vec{r}, t)$  muss als Lösung der Schrödinger-Gleichung die ganze quantenmechanische Information über das betrachtete System enthalten. Diese Information kann keine deterministische sein wie in der klassischen Mechanik, sondern höchstens eine statistische, wie in der Einleitung bereits angedeutet. Als anschaulich für diesen Sachverhalt dient das Experiment von Janossi und Jönsson mit Photonen und Elektronen am Doppelspalt (siehe Kapitel 1).

#### 2.1.4 Statistische Interpretation der Wellenfunktion; Wahrscheinlichkeitsdichte

Überlegungen ähnlich denen, die in Kapitel 1 zum später durchgeführten Experiment von Janossi und Jönsson angedeutet wurden, brachten Max Born (1926) zu der statistischen Deutung der Wellenfunktionen:

*Die Wellenfunktion erlaubt es, die Wahrscheinlichkeit auszurechnen, das Teilchen (beim Einteilchenproblem) in einem bestimmten Zeitintervall  $\Delta t$  in einem Volumen  $\Delta \tau$  zu finden.*

$$\Delta w = \rho(\vec{r}, t) \Delta \tau \Delta t$$

Da die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\rho(\vec{r}, t)$  positiv definit sein muss, sind die einfachsten Möglichkeiten durch folgende Gleichungen gegeben:

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad & \rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)| \\ \text{b)} \quad & \rho(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t) \cdot \psi(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \end{aligned}$$

Wir wenden uns der Definition b) zu, die gewisse Vorteile besitzt (wie bewiesen wird) und eine engere Analogie zur Wellenlehre herstellt. Dort ist die Intensität als Quadrat der Amplitude definiert. Eine weitere Bedingung für  $\rho(\vec{r}, t)$  ergibt sich aus der Wahrscheinlichkeitstheorie. Dort wird die Wahrscheinlichkeit eines mit Gewissheit eintreffenden Ereignisses gleich 1 gesetzt. Da ein Teilchen sich irgendwo im Raum befinden muss, fordert man, dass das Integral über die Wahrscheinlichkeitsdichte über den ganzen Raum gleich 1 ist:

$$\begin{aligned} \int_{R_3} \rho(\vec{r}, t) d\tau &= 1 \quad (\text{Normierungsbedingung}) \\ \int_{R_3} \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d\tau &= \int_{R_3} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1 \end{aligned} \quad (2.1)$$

### 2.1.5 Wahrscheinlichkeitsstrom

Für die Wahrscheinlichkeit muss nun eine Kontinuitätsgleichung gelten. Wir fordern, dass die Wahrscheinlichkeit erhalten bleibt, d.h. eine Abnahme der Wahrscheinlichkeit das Teilchen im Volumen  $V$  zu finden, muss sich als Wahrscheinlichkeitsfluss ( $\vec{j}$ ) durch die Oberfläche des Volumens manifestieren; in Formeln:

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho(\vec{r}, t) d\tau = \int_F \vec{j}(\vec{r}, t) d\vec{f}$$

und mit dem Integralsatz von Gauß folgt:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho(\vec{r}, t) d\tau &= \int_V \text{div } \vec{j}(\vec{r}, t) d\tau \\ \Rightarrow \dot{\rho}(\vec{r}, t) + \text{div } \vec{j}(\vec{r}, t) &= 0 \quad (\text{Kontinuitätsgleichung}) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Behauptung:

Die Gültigkeit von (2.2) trifft nur für die Annahme b) zu:

$$\rho(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

Beweis:

Wir betrachten

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho(\vec{r}, t) d\tau = - \int_V \left[ \underbrace{\psi^*}_{1)} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \underbrace{\psi}_{2)} \right] d\tau$$

Die Ausdrücke 1) und 2) ergeben sich mit der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung zu:

$$\begin{aligned}
1) \quad & \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \right] \psi \\
2) \quad & \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{r}, t) \right] \psi^* \\
\Rightarrow \quad & -\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho(\vec{r}, t) d\tau = -\int_V \dot{\rho}(\vec{r}, t) d\tau \\
& = \frac{\hbar}{2mi} \int_V \left[ \psi^* \left\{ \Delta - \frac{2m}{\hbar} U(\vec{r}, t) \right\} \psi - \left( \left\{ \Delta - \frac{2m}{\hbar} U(\vec{r}, t) \right\} \psi^* \right) \psi \right] d\tau \\
& = \frac{\hbar}{2mi} \int_V \left[ \psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^* - \frac{2m}{\hbar^2} \psi^* U \psi + \frac{2m}{\hbar^2} U \psi^* \psi \right] d\tau \\
& = \frac{\hbar}{2mi} \int_V [\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*] d\tau = \frac{\hbar}{2mi} \int_V \vec{\nabla} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] d\tau \\
& = \int_F \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*] d\vec{f}
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde der Gaußsche Satz benutzt. Wenn wir nun den Wahrscheinlichkeitsstrom definieren durch

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*]$$

dann gilt nach obiger Rechnung

$$\dot{\rho} + \text{div } \vec{j} = 0 \quad \text{q.e.d.}$$

Die Dimension des Stromes müsste sein:

$$|\vec{j}| = \frac{\text{Teilchen}}{\text{Zeiteinheit} \cdot \text{Flächeneinheit}}$$

Wir prüfen dies an obiger Definition:

$$|\vec{j}| = \frac{\text{Energie} \cdot \text{sec}}{\text{g} \cdot \text{cm}^4} = \frac{\text{g cm}^2 \text{ sec}}{\text{sec}^2 \cdot \text{g} \cdot \text{cm}^4} = \frac{1}{\text{sec} \cdot \text{cm}^2}$$

mit: g = Gramm; cm = Zentimeter; sec = Sekunde; q.e.d

### Klassische Betrachtung:

Was würde herauskommen, wenn man vom klassischen Teilchenstrom ausgeht, der definiert ist durch:

$$\vec{j}_{kl}(\vec{r}, t) \stackrel{def}{=} \rho(\vec{r}, t) \vec{v}(\vec{r}, t) = \rho \frac{\vec{p}}{m}$$

Wenn wir nun zur Quantenmechanik übergehen, so gilt:

$$\rho \rightarrow \psi^* \psi \quad \text{und} \quad \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

Hier tritt nun die oben erwähnte Schwierigkeit auf: In welcher Reihenfolge müssen Impuls und Dichte in der klassischen Mechanik angeordnet sein, bevor der Übergang ausgeführt wird? Eine der Möglichkeiten ist, zwei Summanden zu bilden:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m} \left( \psi^* \vec{p} \psi + \psi (\vec{p} \psi)^* \right)$$

und dann  $\vec{p}$  durch  $\hat{p}$  zu ersetzen:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

So erhalten wir gerade den aus der Quantenmechanik abgeleiteten Ausdruck. Wir sehen also wiederum, dass der Übergang nicht eindeutig ist.

### 2.1.6 Erwartungswert

Der Erwartungswert ist der wahrscheinlichste Wert im Sinne der Wahrscheinlichkeitstheorie. Bei einer Messung muss sich dieser Wert nicht ergeben. Nimmt man aber viele Messungen am gleichen System vor, so ergibt sich der Erwartungswert als Mittelwert der Messungen:

- a) Erwartungswert der Ortsvariablen:  $\vec{r}$ :  $\langle \vec{r} \rangle$ .

Definition:

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{R^3} \rho(\vec{r}, t) \vec{r} d\tau = \int_{R^3} \psi^*(\vec{r}, t) \vec{r} \psi(\vec{r}, t) d\tau$$

- b) Erwartungswert eines beliebigen Operators  $V(\vec{r}, t)$ :  $\langle V(\vec{r}, t) \rangle$ .

Definition:

$$\langle V(\vec{r}, t) \rangle = \int \rho(r, t) V(\vec{r}, t) d\tau = \int \psi^*(\vec{r}, t) V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) d\tau$$

Enthalte  $V(\vec{r}, t)$  einen Differentialoperator, so kommt man wieder in Schwierigkeiten. Wie wird ein solcher Operator in die Definition des Erwartungswertes eingefügt?

Wir nehmen die Schrödinger-Gleichung zu Hilfe:

$$E\psi = \left( \frac{\vec{p}^2}{2m} + U(\vec{r}, t) \right) \psi$$

und stellen die sinnvolle Forderung auf, dass:

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{\vec{p}^2}{2m} \right\rangle + \langle U(\vec{r}, t) \rangle \quad (2.3)$$

Diese Gleichung kann aber nur dann für die Erwartungswerte gelten, wenn wir  $\psi^*$  von links und  $\psi$  von rechts an den Operator multiplizieren und dann integrieren:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \int_{R^3} \psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi d\tau \\ \langle \vec{p} \rangle &= \int_{R^3} \psi^* \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi d\tau \end{aligned}$$

So kann die Forderung 1 erfüllt werden, denn durch Einsetzen folgt mit der Schrödinger-Gleichung die Identität von  $\langle E \rangle$  und  $(\langle \frac{\vec{p}^2}{2m} \rangle + \langle U(\vec{r}, t) \rangle)$ .

### 2.1.7 Ehrenfestsches Theorem (1927):

Für die Erwartungswerte gelten die klassischen Gesetze. Da die gesamte klassische Mechanik aus den drei Newtonschen Gesetzen abgeleitet werden kann, genügt es, das Ehrenfestsche Theorem an diesen Gesetzen zu verifizieren. Zwei davon (ein kräftefreies Teilchen bewegt sich mit konstanter Geschwindigkeit auf einer geraden Linie; actio gleich reactio) sind identisch mit dem Impulserhaltungssatz, so dass das Theorem nur noch an

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = \langle \vec{K} \rangle$$

verifiziert werden muss. Wir beschränken uns auf die  $x$  Komponente:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{R_3} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi d\tau = -i\hbar \frac{d}{dt} \int_{R_3} \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi d\tau \\ &= \int_{R_3} \left[ \left( -i\hbar \frac{d}{dt} \psi^* \right) \frac{\partial}{\partial x} \psi + \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left( -i\hbar \frac{d}{dt} \psi \right) \right] d\tau \\ &= \int_{R_3} \left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^* + U \psi^* \right) \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U \psi \right) \right] d\tau \\ &= \int_{R_3} \left[ \psi^* U \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi^* \frac{\partial}{\partial x} (U \psi) + \frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \Delta \psi - \Delta \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \right] d\tau \end{aligned}$$

Mit Hilfe von  $[\frac{\partial}{\partial x}, \Delta] = 0$  und partieller Integration, wobei die Oberflächenintegrale wegen der Normierbarkeit von  $|\psi|^2$  verschwinden, ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{p}_x \rangle &= - \int_{R_3} \psi^* \left[ \frac{\partial}{\partial x} (U \psi) - U \frac{\partial}{\partial x} \psi \right] d\tau \\ &= - \int_{R_3} \psi^* \frac{\partial U}{\partial x} \psi d\tau = - \left\langle \frac{\partial U}{\partial x} \right\rangle = \langle K_x \rangle \quad \text{q.e.d.} \end{aligned}$$

Es gilt also:

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{p} \rangle = \langle \vec{K} \rangle$$

Das Verschwinden von Integralen der Art

$$\int_{0(R_3)} \psi f(\Psi) d\vec{f} \quad ; \quad \psi, \Psi \text{ Wellenfunktion;} \\ ; \quad f(\Psi) \text{ beschränkte Funktion}$$

wird verlangt, weil sonst die Normierungsbedingung (2.1) nicht erfüllt werden kann. Wäre das Oberflächenintegral nicht Null, dann müsste  $\psi$  auch im Unendlichen noch einen von Null verschiedenen Wert haben. Dann würde aber das Normierungsintegral

$$\int_{R_3} \psi^* \psi d\tau$$

divergieren. Im Unendlichen muss  $\psi$  schneller als mit  $r^{-\frac{3}{2}}$  gegen 0 gehen, damit  $\psi$  normierbar bleibt. Wir betrachten nur solche physikalisch sinnvollen Wellenfunktionen. Deshalb verschwinden Oberflächenintegrale der obigen Form.

## 2.2 Kräftefreie Bewegung eines Teilchens

Hier soll nun zunächst die kräftefreie ( $U(\vec{r}, t) = 0$ ) Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen gelöst werden. Sie lautet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

Wir wählen den in solchen Fällen meistens vorteilhaften Separationssatz und geben vor:

$$\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r}) \cdot g(t) \quad (u, g \neq 0 \text{ für alle } \vec{r}, t)$$

$\psi(\vec{r}, t)$  wird zerlegt in eine nur orts- und eine nur zeitabhängige Funktion. Es folgt durch Einsetzen des Ansatzes:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta u(\vec{r}) \cdot g(t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u(\vec{r})g(t) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} g(t) \Delta u(\vec{r}) &= i\hbar u(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} g(t) \quad | \cdot \frac{1}{u \cdot g} \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta u(\vec{r})}{u(\vec{r})} &= i\hbar \frac{\dot{g}(t)}{g(t)} = \text{const.} \stackrel{\text{def}}{=} \hbar\omega \end{aligned}$$

Die linke Gleichung enthält links nur Funktionen von  $\vec{r}$  und rechts nur Funktionen von  $t$ . Die Gleichheit gilt für alle  $\vec{r}$  und  $t$ . Dies ist nur dann möglich, wenn beide Seiten gleich einer Konstanten, dem Separationsparameter, sind, die wir zunächst willkürlich  $\hbar\omega$  nennen (dimensionsmäßig gerechtfertigt!).

Aus der rechten Seite folgt:

$$\dot{g}(t) = -i\omega g(t)$$

Lösung:

$$g(t) = C_1 e^{-i\omega t}$$

Man prüft sofort, dass  $\cos \omega t$  oder  $\sin \omega t$  keine Lösung ist. Die Lösung der Differentialgleichung (Eigenfunktion) ist also wesentlich komplex (Differentialgleichung 1. Ordnung in der Zeit!).

Aus der linken Seite folgt:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Delta u(\vec{r})}{u(\vec{r})} = \hbar\omega; \quad \Delta u + \frac{2m\omega}{\hbar} u = 0$$

Definition:

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

Damit erhalten wir die bekannte Wellengleichung

$$\Delta u(\vec{r}) + k^2 u(\vec{r}) = 0$$

mit der bekannten (nicht wesentlich komplexen) Lösung:

$$u(\vec{r}) = C_2 e^{\pm i\vec{k}\vec{r}}$$

Die Gesamtlösung  $\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r}) \cdot g(t)$  ist eine ebene Welle, die in  $\vec{k}$ -Richtung läuft:

$$\psi(\vec{r}, t) = C e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \text{ Gesamtlösung}$$

Beweis, dass es sich um eine ebene Welle handelt: Wir legen die  $x$ -Achse in die  $k$ -Richtung:

$$\psi(x, t) = C e^{i(kx - \omega t)}$$

Wenn man mit der Welle mitläuft, sieht man eine konstante Amplitude, d.h. die Phase muss stets gleich sein. In diesem Sinne betrachten wir etwa die Phase 0, d.h.  $kx = \omega t$ .

Da die Phasengeschwindigkeit definiert ist als die Ausbreitungsgeschwindigkeit eines Wellenpunktes, d.h. einer konstanten Amplitude, folgt:

$$v_{Phase} = \frac{x}{t} = \frac{\omega}{k} \text{ q.e.d.}$$

Zur Interpretation berechnen wir Wahrscheinlichkeitsdichte und -strom:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}, t) &= \psi^* \psi = |C|^2, \text{ also konstant im ganzen Raum} \\ \vec{j}(\vec{r}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) \end{aligned}$$

In unserem speziellen Fall:

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \\ &= \frac{\hbar}{2mi} C C^* (ik + ik) = \frac{\hbar k}{m} |C|^2 \end{aligned}$$

liegt  $\vec{k}$  nicht parallel zur  $x$ -Achse, dann ergibt sich:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} |C|^2$$

Setzen wir dies gleich dem klassischen Teilchenstrom:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \vec{v}(\vec{r}, t) \cdot \rho(\vec{r}, t)$$

dann folgt durch Vergleich ( $\rho(\vec{r}, t) = \psi^* \psi = |C|^2$ ):

$$\begin{aligned} \vec{v}(\vec{r}, t) &= \frac{\hbar \vec{k}}{m} \\ \Rightarrow \vec{p} &= \hbar \vec{k} \\ p &= \hbar k = \hbar \frac{2\pi}{\lambda} \text{ aus } k\lambda \stackrel{\text{def}}{=} 2\pi \end{aligned}$$

Wir sehen also, dass wir uns im Einklang mit der de Broglie'schen Theorie befinden.

### 2.2.1 Die Energie

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

Der Separationsparameter ist also die Energie.

Dies ist die Berechnung der Energie mittels eines klassischen Ausdrucks und der de Broglie-Beziehung. Wir wollen aber nun den quantenmechanisch analogen Ausdruck, den Erwartungswert, ausrechnen:

$$\begin{aligned}
 E = \langle \hat{E} \rangle &= \int_{R_3} \psi^* i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi d\tau \\
 &= i\hbar C^* C \int_{R_3} e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} \frac{\partial}{\partial t} e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} d\tau \\
 &= |C|^2 \hbar \omega \int_{R_3} d\tau
 \end{aligned}$$

Dieses Integral divergiert. Es handelt sich wieder um das gleiche Problem wie beim Einführen der Wellenfunktion. Hier rührt das Divergieren des Integrals daher, dass die ebene Welle noch nicht vernünftig normiert ist. Die Freiheit zu normieren haben wir noch, denn die Konstante  $C$  ist noch nicht festgelegt.

## 2.2.2 Normierung

Ziel ist es,  $\psi$  so zu normieren, dass

$$\int_{R_3} \psi^* \psi d\tau = 1$$

wird. Dies ist jedoch für die ebene Welle nicht möglich. Man hilft sich durch die Überlegung, dass jedes Experiment von einem (manchmal vielleicht sehr großen) Würfel mit Volumen  $V$  eingeschlossen werden kann, ohne die Resultate zu ändern. Die Wellenfunktion wird dann wie folgt normiert:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

Behauptung:

$$\int_V \psi^* \psi = 1$$

Beweis:

$$\int_V \psi^* \psi = \frac{1}{V} \int_V 1 d\tau = \frac{1}{V} \cdot V = 1 \text{ (q.e.d.)}$$

Zurück zur Energie:

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= i\hbar \frac{1}{V} \int_V e^{-i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} \frac{\partial}{\partial t} e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} d\tau \\
 &= i\hbar \frac{1}{V} \int_V (-i\omega) d\tau = \hbar \omega \frac{1}{V} \cdot V = \hbar \omega
 \end{aligned}$$

Somit haben wir auch aus unserer quantenmechanischen Rechnung heraus bekommen, dass der Separationsparameter die Energie ist.

## 2.2.3 Allgemeine Welle in $x$ -Richtung

Eine Beschreibung eines Teilchens durch eine ebene Welle ist besonders deshalb nicht vorteilhaft, weil das Teilchen schwer zu lokalisieren ist. Aus der Wellenlehre wissen wir, dass man eine Wellengruppe konstruieren kann, wenn man ebene Wellen verschiedener Frequenzen und Amplituden überlagert. Ein Wellenpaket (= Wellengruppe), das in  $x$ -Richtung läuft, kann man allgemein beschreiben durch:

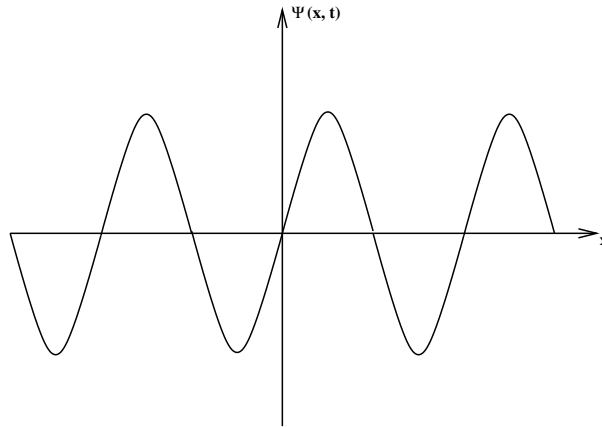


Abb. 2.1: ebene Welle

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (2.4)$$

$C(k)$  ist eine Gewichtsfunktion, die jeder einzelnen ebenen Welle der Überlagerung ein Gewicht zuordnet.  $C(k)$  wird auch Impulsverteilung genannt.

Mit  $\hbar\omega = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , der Dispersionsrelation, folgt:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C(k) e^{i(kx - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} t)} dk$$

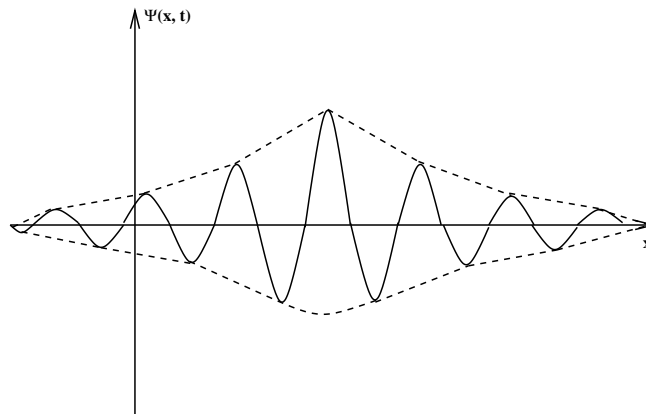


Abb. 2.2: Wellenpaket

Dieses  $\psi$  ist eine additive Überlagerung unendlich vieler einzelner ebenen Wellen. Wegen der Linearität von Wellenfunktionen ist also  $\psi(x, t)$  auch eine Lösung der zeitabhängigen (linearen!) Wellengleichung. Das Integral existiert, wenn  $C(k)$  mindestens wie  $\frac{1}{|k|}$  gegen 0 geht für  $|\vec{k}| \rightarrow \infty$ .

Wenn wir nun die Anfangsbedingung  $\psi(x, 0)$  vorgeben, so können wir  $\psi(x, t)$  vollständig bestimmen. Dazu benötigt man etwas mehr Mathematik, die in Anhang A und B abgehandelt wird.

Da es sich bei der Schrödinger-Gleichung um eine Differentialgleichung von 1. Ordnung in der Zeit handelt, ist die Lösung durch Vorgabe der Anfangsbedingung  $\psi(x, t = 0)$  eindeutig bestimmt. Man wählt als  $\psi(x, 0)$  die Gauß'sche Glockenkurve.

$$\psi(x, 0) = A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x} \quad (2.5)$$

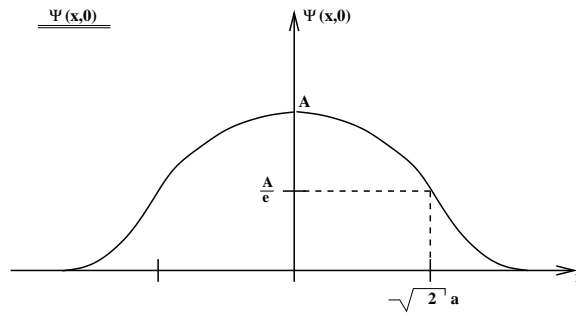


Abb. 2.3:

Die Dichte:

$$\rho(x, 0) = \psi^*(x, 0) \cdot \psi(x, 0) = |A|^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}}$$

Die Stromdichte:

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{\hbar}{2mi} \left( \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) \\ &= |A|^2 \frac{\hbar}{2mi} \left[ e^{-\frac{x^2}{a^2} - ik_0 x} \left( -\frac{x}{a^2} + ik_0 \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x} \right. \\ &\quad \left. - e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x} \left( -\frac{x}{a^2} - ik_0 \right) e^{-\frac{x^2}{2a^2} - ik_0 x} \right] \\ &= |A|^2 \frac{\hbar}{2mi} \left[ e^{-\frac{x^2}{a^2}} \left( \left( -\frac{x}{a^2} + ik_0 \right) - \left( -\frac{x}{a^2} - ik_0 \right) \right) \right] \\ j_x &= \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 2ik_0 e^{-\frac{x^2}{a^2}} \\ j_x &= \frac{\hbar}{m} \rho(x, 0) k_0 \end{aligned}$$

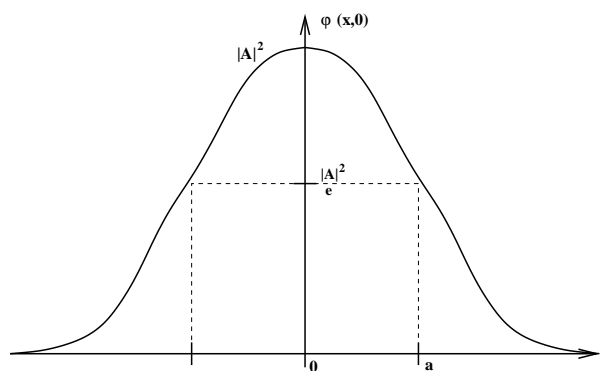


Abb. 2.4:

und aus der klassischen Betrachtung

$$\begin{aligned} j_x &= \rho \cdot v \\ \Rightarrow j_x &= \frac{\hbar}{m} \rho(x, 0) k_0 = \rho \cdot v \\ \Rightarrow v &= \frac{\hbar}{m} k_0 \end{aligned}$$

und die von den ebenen Wellen her bekannte Beziehung

$$p = m \cdot v = \hbar k_0$$

ergibt sich auch im Falle des Wellenpakets.

### 2.2.4 Normierung von $\psi(x, 0)$

Da das Teilchen irgendwo entlang der  $x$ -Achse sein muss, ist  $\psi(x, 0)$  auf 1 zu normieren:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x, 0) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = |A|^2 a \sqrt{\pi}$$

Benutzt man das Integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$$

so folgt:

$$|A|^2 = \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \quad (2.6)$$

als Normierungsbedingung für  $\psi(x, 0)$ . Als nächstes bestimmen wir nun die

### 2.2.5 Impulsverteilung $C(k)$ des Wellenpaketes $\psi(x, 0)$

durch eine Fouriertransformation. Hier bedeutet diese ein Übergang von der Orts- zur Impulsdarstellung. Wir benötigen jetzt, dass das System

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

vollständig und orthogonal ist (siehe Anhang B):

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_k^*(x') u_k(x) dk = \delta(x - x')$$

und

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_k^*(x) u_{k'}(x) dx = \delta(k - k')$$

Die allgemeine Lösung  $\psi(x, t)$  (2.4) der Schrödinger-Gleichung für ein in positive  $x$ -Richtung laufendes Teilchen ist

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega t)} dk$$

und für  $t = 0$

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} dk \quad (2.7)$$

wo das vollständige Orthonormalsystem  $u_k(x)$  auftritt. Integriert man (2.7) von links mit

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx u_{k'}^*(x) \dots,$$

so erhält man:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx u_{k'}^*(x) \psi(x, 0) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) \int_{-\infty}^{\infty} dx u_{k'}^*(x) u_k(x) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk C(k) \delta(k - k') \\ &= C(k) \end{aligned}$$

Setzt man auf der linken Seite  $u_k^*(x)$  und den vorgegebenen Anfangswert  $\psi(x, 0)$  (2.5) ein, so folgt:

$$\begin{aligned} C(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx} A e^{-\frac{x^2}{2a^2} + ik_0 x} \\ C(k) &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x} \end{aligned}$$

Wir ergänzen den Exponenten zum vollständigen Quadrat, indem wir den Summanden

$$-\frac{a^2}{2} (k_0 - k)^2$$

addieren und subtrahieren:

$$\begin{aligned} C(k) &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2a^2} + i(k_0 - k)x + \frac{a^2}{2} (k_0 - k)^2} e^{-\frac{a^2}{2} (k_0 - k)^2} \\ C(k) &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\left(\frac{x}{\sqrt{2a}} - i\frac{a}{\sqrt{2a}}(k_0 - k)\right)^2} \cdot e^{-\frac{a^2}{2} (k_0 - k)^2} \end{aligned}$$

Durch die Substitutionen

$$z = \frac{x}{\sqrt{2a}} - i\frac{a}{\sqrt{2a}}(k - k_0); \quad dz = \sqrt{2} a dx$$

und die Beziehung

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi}$$

folgt

$$\begin{aligned} C(k) &= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{2} a e^{-\frac{a^2}{2} (k - k_0)^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz \\ C(k) &= A a e^{-\frac{a^2}{2} (k - k_0)^2} \end{aligned}$$

## 2.2.6 Unschärfen im Orts- und Impulsraum

Die Dichte im Impulsraum ist gegeben durch:

$$C^*(k)C(k) = |A|^2 a^2 e^{-a^2(k-k_0)^2} = \frac{a}{\sqrt{\pi}} e^{-a^2(k-k_0)^2}$$

Die halbe Breite dieser Impulsverteilung, definiert durch das  $k$ , wo  $C^*C$  auf den  $e$ -ten Teil abgefallen ist, ergibt sich zu:

$$\begin{aligned}\Delta k &= \frac{1}{a} \quad \text{an der Stelle } k_0 \\ \Rightarrow \Delta p &= \frac{\hbar}{a}\end{aligned}$$

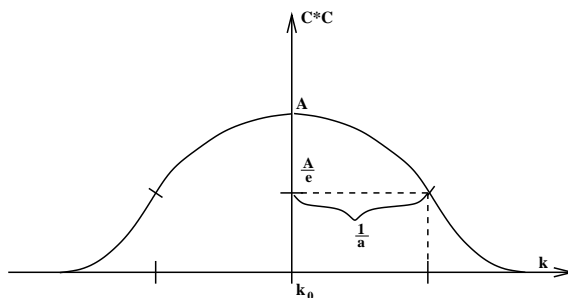


Abb. 2.5:

Die halbe Breite der Verteilung  $\rho(x, 0)$  war  $\Delta x = a$ .

Für diese Unschärfen  $\Delta x$  und  $\Delta p$  folgt:

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{a} \cdot a = \hbar$$

oder mit einer immer vorhandenen Messungenauigkeit besser

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar \quad (2.8)$$

Die Unschärfe ist hier definiert durch die halbe Breite der Dichten im Orts- bzw. Impulsraum. An der Beziehung (2.8) erkennt man, dass eine Verringerung der Impulsunschärfe eine Vergrößerung der Ortsunschärfe zur Folge hat und umgekehrt. Wird eine der beiden Größen scharf, so ist die andere beliebig unsharp. In der ebenen Welle z.B. ist der Impuls scharf ( $\Delta p = 0$ ) und der Ort unbeliebig scharf ( $\Delta x = \infty$ ).

## 2.2.7 Eigenfunktionen

Der entscheidende Schritt in der Berechnung der Impulsverteilungsamplitude  $C(k)$  war die Fouriertransformation, der Übergang von

$$\psi(x, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} dx$$

zu

$$C(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, 0) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik'x} dx$$

Allgemein:

$$\begin{aligned}f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(y) e^{ixy} dy \\ \Rightarrow g(y) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ixy} dx\end{aligned}$$

Man kann aber auch das Vorgehen wie folgt beschreiben: Wir haben  $\psi(x, 0)$  nach den Eigenfunktionen des Impulses entwickelt. Durch die Fouriertransformation haben wir die Entwicklungskoeffizienten  $C(k)$  bestimmt. Eigenfunktionen  $u_k(x)$  des Impulses sind definiert durch:

$$\hat{p}_x u_k(x) = p_x u_k(x)$$

Man prüft leicht nach, dass

$$u_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$$

die Impulseigenfunktionen sind:

$$\hat{p}_x u_k(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} = \hbar k u_k(x)$$

### 2.2.8 Entwicklung des Wellenpakets mit der Zeit

Wir führen nun die Impulsverteilungsamplitude  $C(k)$  in die allgemeine Lösung  $\psi(x, t)$  ein:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} C(k) u_k(x) e^{-i\omega t} dk \\ \psi(x, t) &= \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2} a^2 (k-k_0)^2 + ikx - \frac{i\hbar k^2}{2m} t} dk \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} C(k) &= Aa e^{-\frac{1}{2} a^2 (k-k_0)^2}; \\ u_k(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}; \\ \hbar\omega &= \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \omega(k) = \frac{\hbar}{2m} k^2 \end{aligned}$$

Auch dieses Integral kann man zurückführen auf die Form

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi}$$

Es folgt:

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{1 + i\frac{\hbar t}{ma^2}}} \exp\left(-\frac{x^2 - 2ia^2 k_0 x + i\frac{\hbar a^2 k_0^2}{m} t}{2a^2(1 + i\frac{\hbar}{ma^2} t)}\right)$$

Physikalische Dichte:

$$\rho(x, t) = \psi^* \psi = \frac{|A|^2}{\sqrt{1 + (\frac{\hbar t}{ma^2})^2}} \exp\left(-\frac{(x - \frac{\hbar k_0}{m} t)^2}{a^2(1 + (\frac{\hbar t}{ma^2})^2)}\right)$$

Veränderungen des Pakets mit der Zeit:

1. Die Höhe (Amplitude) nimmt ab. Definition

$$|A(t)|^2 = \frac{|A|^2}{\sqrt{1 + (\frac{\hbar t}{ma^2})^2}}$$

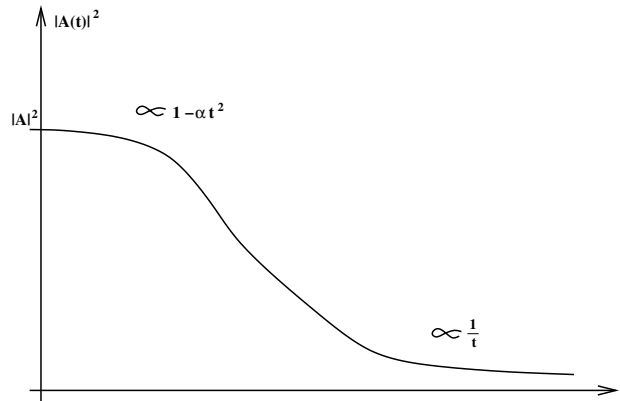


Abb. 2.6:

dann ergibt sich folgender Zusammenhang:

Für kleine  $t$  kann die Wurzel in  $|A(t)|^2$  entwickelt werden. Daraus folgt:

$$|A(t)|^2 \sim 1 - \alpha t^2 \text{ für } t \text{ klein}$$

$$\text{und } |A(t)|^2 \sim \frac{1}{t} \text{ für } t \text{ groß}$$

weil dann die anderen Faktoren nicht mehr ins Gewicht fallen.

- Das Maximum der Dichteamplitude ist da, wo der Exponent Null ist.

$$\begin{aligned} \Rightarrow x - \frac{\hbar k_0}{m} t &= 0 \\ \Rightarrow x &= \frac{\hbar k_0}{m} t \\ \Rightarrow v &= \frac{x}{t} = \frac{\hbar k_0}{m} \end{aligned}$$

Das Paket bewegt sich also mit der Geschwindigkeit  $v = \frac{\hbar k_0}{m}$  nach rechts.

- Breite der Verteilung  $\rho(x, t)$ . Die halbe Breite beim  $1/e$ -Abfall (Unschärfe) sei mit  $b$  bezeichnet

$$b = a \sqrt{1 + \left( \frac{\hbar t}{ma^2} \right)^2}$$

Für große Zeiten nimmt  $b$  linear zu und nähert sich der Asymptoten  $b = \frac{\hbar t}{ma}$ .

Wir müssen also feststellen, dass das Wellenpaket mit der Zeit zerfließt. Der Grund sind die verschiedenen Anfangsimpulse und die Dispersionsfunktion für Materiewellen:

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

Ein Lichtwellenpaket mit dem Dispersionsgesetz

$$\omega(k) = \alpha k$$

zerfließt nicht. Dies ist ein wesentlicher Unterschied zwischen Licht- und Materiewellen.

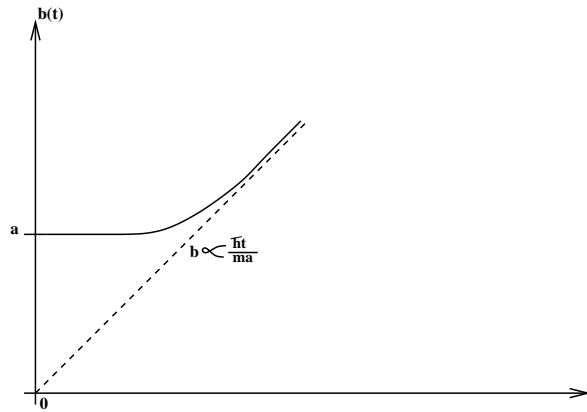


Abb. 2.7:

Beispiele:

Zur Illustration behandeln wir eine makroskopische Kugel als ein Wellenpaket und fragen: Wie lange braucht eine 1 mm dicke Kugel von 1 g Gewicht, um ihren Durchmesser zu verdoppeln?

Die Verbreitungsgeschwindigkeit beträgt:

$$\begin{aligned}
 v &= \frac{b}{t} = \frac{\hbar t}{ma} \\
 \Rightarrow x &= \frac{\hbar}{ma} t_e + 2a \stackrel{!}{=} 4a \text{ (Verdoppelung!)} \\
 \Rightarrow 2a &= \frac{\hbar}{ma} t_e \\
 \Rightarrow t_e &= \frac{2 \cdot 2\pi \cdot 1[g] \cdot 0,25 \cdot 10^{-2}[cm^2]}{6,626 \cdot 10^{-27}[erg \cdot sec]} \\
 t_e &= 0,5 \cdot 10^{25}[sec] \approx 3 \cdot 10^{19}[Jahre]
 \end{aligned}$$

Es dauert mehr als  $10^{19}$  Jahre, bis die Massenkugel ihren Durchmesser von 1 mm auf 2 mm verdoppelt hat.

Wie lange dauert dieser Prozess bei einem Elektron?

$$\begin{aligned}
 \text{Radius} &= a = \frac{e^2}{mc^2} \text{ (klassischer Elektronenradius)} \\
 2a &= \frac{\hbar}{ma} t_e \text{ (wie oben)} \\
 t_e &= \frac{2ma^2}{\hbar} = \frac{2e^4 m}{\hbar m^2 c^4} = 2 \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \cdot \frac{\hbar}{mc} \cdot \frac{1}{c} \\
 t_e &= 2 \cdot \frac{1}{137^2} \cdot 0,3 \cdot 10^{-10} \cdot \frac{1}{3 \cdot 10^{10}} \\
 &\approx 10^{-25}[sec]
 \end{aligned}$$

Die Durchmesserverdopplungszeit beträgt nur  $10^{-25}$  sec.

## 2.2.9 Gruppengeschwindigkeit

Wir definieren die Gruppengeschwindigkeit allgemein durch die Geschwindigkeit des Maximums eines Wellenpaketes. Wir wollen nun einen allgemeinen Ausdruck für die Gruppengeschwindigkeit ableiten: Betrachtet man die Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} C(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(kx - \omega(k)t)} dk$$

die ein Wellenpaket von ein wenig verschiedenen monochromatischen Wellen beschreibt;  $C(k)$  sei so gewählt, dass es außerhalb eines Intervalls  $(k_0 - \Delta k, k_0 + \Delta k)$  verschwindet. Man entwickelt:

$$\begin{aligned} k &= k_0 + (k - k_0) = k_0 + \xi \\ \omega(k) &= \omega_0 + (k - k_0) \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k=k_0} + \dots \\ C(k) &\approx C(k_0) \\ \Rightarrow \psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} C(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(x - \frac{\partial \omega}{\partial k}|_{k=k_0} t)\xi} d\xi \end{aligned}$$

bis zum Term erster Ordnung in  $\xi$ . Benutzt man

$$\sin \alpha = \frac{e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}}{2i} \text{ und } \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1$$

so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &\approx C(k_0) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} 2 \cdot \frac{\sin(\{x - \frac{\partial \omega}{\partial k}|_{k=k_0} t\}\xi)}{x - \frac{\partial \omega}{\partial k}|_{k=k_0} t} \\ &= C(k_0, x, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \end{aligned}$$

wenn

$$C(k_0, x, t) = 2C(k_0) \cdot \frac{\sin(\{x - \frac{\partial \omega}{\partial k}|_{k=k_0} t\}\xi)}{x - \frac{\partial \omega}{\partial k}|_{k=k_0} t}$$

$C(k_0, x, t)$  hat das Maximum bei

$$\begin{aligned} x - \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k=k_0} t &= 0 \\ \Rightarrow v_{gr} = \frac{x}{t} &= \left. \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} \right|_{k=k_0} \end{aligned}$$

Damit erhält man einen allgemeinen Ausdruck für die Gruppengeschwindigkeit einer Materiewelle mit der Dispersionsfunktion  $\omega(k)$ .

## 2.3 Der eindimensionale harmonische Oszillator

Nach der Lösung der kräftefreien Schrödinger-Gleichung in 2.2 soll nun ein einfaches Problem quantenmechanisch besprochen werden, das ein Potential erhält.

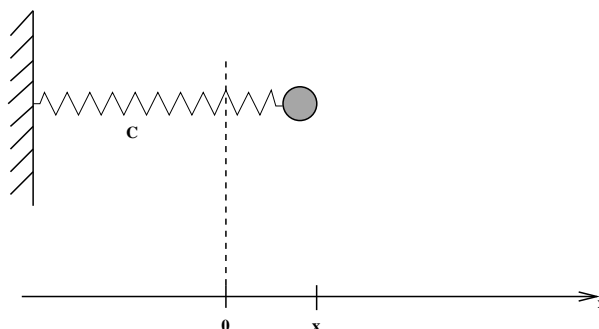


Abb. 2.8:

Bei einer Auslenkung um  $x$  aus der Ruhelage tritt die Richtkraft  $F(x) = -Cx$  auf, wobei  $C$  die Federkonstante ist.

$$\begin{aligned}
F(x) &= -Cx = m\ddot{x} \\
\Rightarrow \ddot{x} + \frac{C}{m}x &= 0
\end{aligned}$$

Diese Differentialgleichung hat die allgemeine Lösung

$$x(t) = A \sin \omega t + B \cos \omega t$$

mit

$$\begin{aligned}
\omega &= \sqrt{\frac{C}{m}} \Leftrightarrow C = m\omega^2 \\
F(x) &= -Cx = -m\omega^2 x \\
V(x) &= -\int_0^x F(x) dx = \frac{1}{2} Cx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2
\end{aligned}$$

Der harmonische Oszillator hat deshalb in der Quantenmechanik eine große Bedeutung, weil er viele Potentiale in erster Näherung beschreibt. Das Potential eines zwei-atomigen Moleküls als Funktion des Abstandes der beiden Atome hat etwa folgenden Verlauf:

Um die Lage  $x_0$  kann man dieses Potential durch das des harmonischen Oszillators approximieren.

### 2.3.1 Quantenmechanische Betrachtung

Die Hamiltonfunktion  $\tilde{H}$  ist nun gegeben durch:

$$\begin{aligned}
\tilde{H} &= H - E = T + U - E = 0 \\
\tilde{H}(x, p) &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} Cx^2 - E
\end{aligned}$$

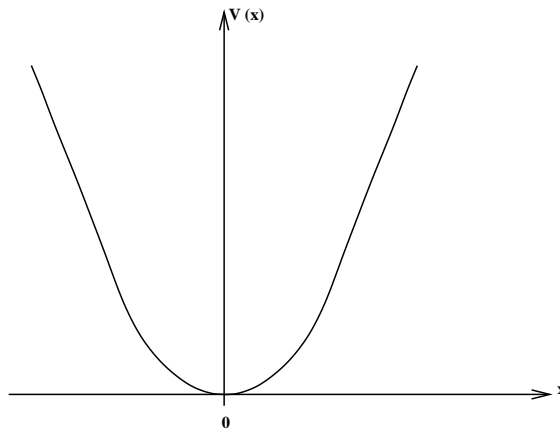


Abb. 2.9:

Nach Rezept 1 in der Ortsdarstellung folgt:

$$\tilde{H}(x, \tilde{p}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

und nach Rezept 2 folgt die Schrödinger-Gleichung:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \quad (2.9)$$

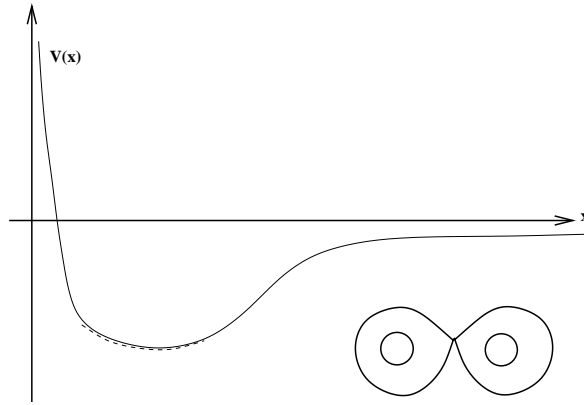


Abb. 2.10:

Wir fordern natürlich wieder, dass  $\psi$  normierbar ist, damit die Wellenfunktion physikalisch sinnvoll ist. Wieder wendet man einen Separationssatz an:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= u(x) \cdot g(t) \\ \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} g(t) \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \cdot u(x)g(t) &= i\hbar u(x) \cdot \dot{g}(t) \end{aligned}$$

durch  $\psi(x, t)$  dividieren:

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x)}{u(x)} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = i\hbar \frac{\dot{g}(t)}{g(t)} = \text{const.} = \hbar\omega = E$$

nach den gleichen Überlegungen wie beim kräftefreien Fall.

$$\Rightarrow \dot{g}(t) = -i \frac{E}{\hbar} g(t)$$

mit der Lösung:

$$g(t) = e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \quad (2.10)$$

Dieses Ergebnis kann man verallgemeinern: In allen Problemen, wo der Hamiltonoperator  $\tilde{H}$  nicht explizit von der Zeit abhängt, ist die Zeitabhängigkeit von  $\psi(x, t)$  gegeben durch (2.10):

$$\begin{aligned} \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left( u(x) \cdot g(t) \right) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u(x) \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \\ &= u(x) \cdot E g(t) = E \psi(x, t) \end{aligned}$$

d.h. die rechte Seite der Gleichung (2.9) kann zu

$$E \psi(x, t)$$

vereinfacht werden. Die zu lösende Gleichung reduziert sich zu:

$$\begin{aligned} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \psi(x, t) &= E \psi(x, t) \\ \Rightarrow \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) u(x) &= E u(x) \end{aligned} \quad (2.11)$$

Gesucht ist also die Funktion  $u(x)$ , die (2.11) erfüllt:

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 x^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \right) u(x) = 0 \quad (2.12)$$

Definieren:

$$\lambda^2 = \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^2 \quad \text{und} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + (k^2 - \lambda^2 x^2) u = 0 \quad (2.13)$$

da in diesem Falle partielle und totale Ableitung übereinstimmen. Substitution:

$$\begin{aligned} y(x) &= \lambda x^2 \\ \frac{d}{dx} &= \frac{dy}{dx} \frac{d}{dy} = 2\lambda x \frac{d}{dy} \\ \frac{d^2}{dx^2} &= 2\lambda \frac{d}{dy} + 2\lambda x \frac{d}{dy} \cdot \frac{d}{dy} = 2\lambda \frac{d}{dy} + 4\lambda^2 x^2 \frac{d^2}{dy^2} \\ &= 4\lambda y \frac{d^2}{dy^2} + 2\lambda \frac{d}{dy} \end{aligned}$$

Dividieren wir (2.13) durch  $4\lambda$ , dann folgt durch die Substitution

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\lambda} \frac{d^2 u}{dx^2} + \left( \frac{k^2}{4\lambda} - \frac{\lambda^2 x^2}{4\lambda} \right) u &= 0 \\ \frac{1}{4\lambda} \left( 4\lambda y \frac{d^2 u}{dy^2} + 2\lambda \frac{du}{dy} \right) + \left( \frac{k^2}{4\lambda} + \frac{y}{4} \right) u &= 0 \\ y \frac{d^2 u}{dy^2} + \frac{1}{2} \frac{du}{dy} + \left( \frac{\mu}{2} - \frac{y}{4} \right) u &= 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

wenn definiert wird:

$$\mu = \frac{k^2}{2\lambda} = \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{E}{\hbar\omega}$$

$\mu$  ist also die Energie in Einheiten von  $\hbar\omega$ , der Oszillatorenenergie. Für große  $y$  bestimmen die Terme  $y \frac{d^2 u}{dy^2}$  und  $\frac{y}{4} u$  das Verhalten von (2.14), d.h. für große  $y$  ist

$$y \frac{d^2 u}{dy^2} + \frac{y}{4} u = 0$$

Diese Gleichung hat Lösungen der Form  $e^{\pm \frac{1}{2}y}$ . Da  $u(x)$  normiert sein muss, kommt nur  $e^{-\frac{1}{2}y}$  in Frage. Deshalb der Ansatz:

$$u(y) = e^{-\frac{1}{2}y} f(y)$$

Mit diesem Ansatz gehen wir in (2.14) und erhalten

$$\begin{aligned}\frac{du}{dy} &= u'(y) = \left( f'(y) - \frac{1}{2} f(y) \right) e^{-\frac{1}{2}y} \\ u''(y) &= \left( f''(y) - \frac{1}{2} f'(y) - \frac{1}{2} f'(y) + \frac{1}{4} f(y) \right) \cdot e^{-\frac{1}{2}y} \\ &= \left( f''(y) - f'(y) + \frac{1}{4} f(y) \right) e^{-\frac{1}{2}y}\end{aligned}$$

Die Differentialgleichung lautet damit:

$$\begin{aligned}e^{-\frac{1}{2}y} \left[ y \cdot f''(y) - y \cdot f'(y) + \frac{1}{4} y f(y) + \frac{1}{2} f'(y) \right. \\ \left. - \frac{1}{4} f(y) + \frac{\mu}{2} f(y) - y \cdot \frac{1}{4} f(y) \right] &= 0 \\ y f''(y) + \left( \frac{1}{2} - y \right) f'(y) + \left( \frac{\mu}{2} - \frac{1}{4} \right) f(y) &= 0\end{aligned}\quad (2.15)$$

Diese Differentialgleichung hat die Form der so genannten konfluenten hypergeometrischen Differentialgleichung, deren allgemeine Form lautet:

$$y f''(y) + (C - y) f'(y) - a f(y) = 0 \quad (2.16)$$

Sie wird in Anhang C näher untersucht.

Die Schrödinger-Gleichung des harmonischen Oszillators ist identisch mit der konfluenten Differentialgleichung mit folgenden Substitutionen:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= u(x) e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \\ u(x) &= e^{-\frac{1}{2}y} f(y) \\ y &\equiv \lambda x^2; \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar}; \quad C = \frac{1}{2}; \quad a = \frac{1}{4} - \frac{\mu}{2}; \quad \mu = \frac{E}{\hbar\omega}\end{aligned}$$

Ein Vergleich mit der allgemeinen Lösung der Konfluenten (A3.2) ergibt die allgemeine Lösung für unser Problem:

$$\begin{aligned}f(y) &= D_1 {}_1F_1(a; c; y) + D_2 y^{1-c} {}_1F_1(a - c + 1; 2 - c; y) \\ f(y) &= D_1 {}_1F_1\left(a; \frac{1}{2}; y\right) + D_2 y^{\frac{1}{2}} {}_1F_1\left(a + \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; y\right)\end{aligned}$$

Da nun mit  $\psi(x, t)$  auch

$$u(x) = e^{-\frac{1}{2}y} f(y) = e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} f(y)$$

normierbar sein soll, muss  $f(y)$  für  $y \rightarrow \infty$  weniger als die Exponentialfunktion  $e^{-\frac{1}{2}y}$  divergieren. Die Asymptotik von  $f(y)$  für  $y \rightarrow \infty$  findet sich in Anhang C.

$$F(a; c; y) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^y y^{a-c}$$

Betrachte nun die beiden Summanden der Lösung  $f(y)$  einzeln:

$\alpha)$   $D_2 = 0$ :

Der  $D_1$ -Term von  $f(y)$  divergiert im Widerspruch zu der obigen Forderung schneller als erlaubt. Deshalb ist der tragende Term zum Verschwinden zu bringen. Dies kann geschehen entweder durch

$$\Gamma(c) = 0$$

oder durch

$$\Gamma(a) = \infty$$

Die erste Möglichkeit ist ausgeschlossen, weil  $c = \frac{1}{2}$  festgelegt ist. Also muss gelten:

$$\Gamma(a) = \infty$$

Da  $\Gamma(z)$  bei  $z = 0, -1, -2, -3, \dots$  Pole hat, erhalten wir für  $a$  die Quantisierungsbedingung

$$\begin{aligned} a &= 0, -1, -2, -3, \dots = -n, \quad n \in \mathbb{N} \\ \mu &= -2a + \frac{1}{2} = 2n + \frac{1}{2} \\ \mu &= \frac{E}{\hbar\omega} \end{aligned}$$

Das ergibt die Energiequantelung:

$$E_{2n} = \hbar\omega \left( 2n + \frac{1}{2} \right)$$

$\beta)$   $D_1 = 0$ :

Der  $D_2$ -Term enthält die gleiche Asymptotic, deshalb muss hier gelten:

$$a - c + 1 = 1 + \frac{1}{2} = -n, \quad n \in \mathbb{N}$$

mit

$$a = \frac{1}{4} - \frac{\mu}{2}$$

folgt hier

$$\begin{aligned} \mu &= 2n + 1 + \frac{1}{2} = \frac{E}{\hbar\omega} \\ E_{2n+1} &= \hbar\omega \left( 2n + 1 + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Fassen wir die Ergebnisse aus  $\alpha)$  und  $\beta)$  zusammen, so lautet die aus der Normierungsbedingung abgeleitete Energiequantelung

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Die Energie ist gequantelt in Werte, die sich um  $\hbar\omega$  unterscheiden. Das System des harmonischen Oszillators kann nur ganz diskrete Energiewerte annehmen. Die tiefste Energiestufe ( $n = 0$ ) ist  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ . Im Gegensatz zu der klassischen Vorstellung als nicht Null (Nullpunktsenergie).

### 2.3.2 Oszillatorlänge

Nun kann man die Lösung  $u(x)$  auch noch umschreiben mit Hilfe der Hermiteschen Polynome:

$$\begin{aligned} u_{2n}(x) &= D_1 e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} {}_1F_1\left(-n; \frac{1}{2}; \lambda x^2\right) \\ &= C_{2n} e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} H_{2n}(x\sqrt{\lambda}) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} u_{2n+1}(x) &= D_2 \cdot e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} x\sqrt{\lambda} {}_1F_1\left(-n; \frac{3}{2}; \lambda x^2\right) \\ &= C_{2n+1} e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2} H_{2n+1}(x\sqrt{\lambda}) \end{aligned}$$

oder zusammengefasst:

$$u_n(x) = C_n H_n(x\sqrt{\lambda}) e^{-\frac{1}{2}\lambda x^2}$$

wobei  $C_k$  noch zu bestimmende Normierungskonstanten sind. Da  $\lambda x^2$  als Exponent auftritt, muss es dimensionslos sein. Definiere:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{b^2}, \quad b \text{ Oszillatorlänge} \\ b &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \frac{\hbar}{m \cdot c} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar\omega}} \\ \frac{\hbar}{mc^2} &\text{ ist die Comptonwellenlänge,} \\ &\text{ ist die Ruheenergie und} \\ \hbar\omega &\text{ die Oszillatorenergie,} \\ b &\text{ hat die Dimension einer Länge.} \end{aligned}$$

$$\xi = x\sqrt{\lambda} = \frac{x}{b}$$

ist, wie gefordert, dimensionslos. Es folgt für die Hamiltonfunktion:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2} \hbar\omega \left( -\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \xi^2 \right)$$

und für  $u_n(x)$  ergibt sich jetzt:

$$u_n(x) = C_n H_n\left(\frac{x}{b}\right) e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{b}\right)^2}$$

$$H_0\left(\frac{x}{b}\right) = 1 \Rightarrow u_0(x) = C_0 e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{b^2}} \quad (\text{Gauß'sche Glockenkurve!})$$

$$H_1\left(\frac{x}{b}\right) = 2\frac{x}{b} \Rightarrow u_1(x) = C_1 2\frac{x}{b} e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{b^2}}$$

$$H_2\left(\frac{x}{b}\right) = 4\frac{x^2}{b^2} \Rightarrow u_2(x) = C_2 4\frac{x^2}{b^2} e^{-\frac{1}{2}\frac{x^2}{b^2}}$$

⋮

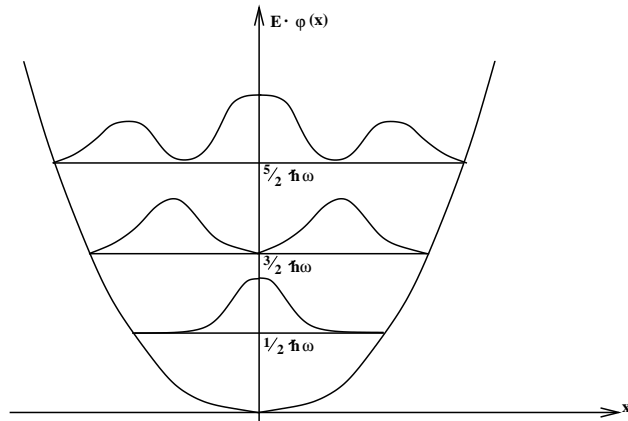


Abb. 2.11: Energieniveaus mit der zugehörigen Funktion  $u_n(x)$

**Normierung von  $u_n(x)$ :**

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} |u_n(x)|^2 dx = C_n^2 b \int_{-\infty}^{\infty} |H_n(\xi)|^2 e^{-\xi^2} d\xi$$

wegen

$$\xi = \frac{x}{b} \text{ und } dx = b d\xi$$

$$I = C_n^2 b \int_{-\infty}^{\infty} d\xi H_n(\xi) e^{-\xi^2} e^{+\xi^2} (-)^n \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2})$$

mit Hilfe der erzeugenden Darstellung (Anhang C) von  $H_n$ . Durch partielle Integration und Verschwinden des integralfreien "Oberflächen"-Terms ( $e^{-\xi^2}$  verschwindet im Unendlichen) folgt:

$$I = C_n^2 b \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi)$$

Da die höchste Potenz von  $H_n(\xi)$  von der Ordnung  $n(\xi^n)$  ist, führt die Differentiation zu einer Konstanten:

$$\frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) = \frac{d^n}{d\xi^n} (-)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} = \frac{d^n}{d\xi^n} \left( e^{\xi^2} (2\xi)^n e^{-\xi^2} + \dots \right)$$

Die niedrigen Potenzen überleben die noch vorzunehmende Differentiation  $\frac{d^n}{d\xi^n}$  nicht. Das Endresultat ist eine Konstante:

$$\Rightarrow \frac{d^n}{d\xi^n} H_n(\xi) = 2^n n!$$

$$\Rightarrow I = C_n^2 b 2^n n! \int_{-\infty}^{\infty} d\xi e^{-\xi^2} = C_n^2 b 2^n n \sqrt{\pi}$$

Mit der Normierungsbedingung  $I = 1$  folgt für die Konstante  $C_n$ :

$$C_n^2 b 2^n n! \sqrt{\pi} = 1$$

$$C_n = [2^n n! \sqrt{\pi} b]^{-\frac{1}{2}}$$

Die ortsabhängigen Teile der Wellenfunktion  $\psi(x, t)$  lassen sich nun explizit angeben:

$$\begin{aligned}
u_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} b}} e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2}{b^2}} \\
u_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{\pi} b}} 2 \left( \frac{x}{b} \right) e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2}{b^2}} \\
u_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{8\sqrt{\pi} b}} \left( 4 \left( \frac{x}{b} \right)^2 - 2 \right) e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2}{b^2}} \\
&\vdots
\end{aligned}$$

### 2.3.3 Aufenthaltswahrscheinlichkeit

Nach der vollständigen Lösung der Schrödinger-Gleichung kann man jetzt einen Vergleich zwischen der klassischen und der quantenmechanischen Betrachtungsweise anstellen. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ergibt sich

- a) klassisch aus der Proportionalität zur reziproken Geschwindigkeit:

$$\begin{aligned}
\rho(x) &\propto \frac{1}{V} = \frac{1}{\dot{x}} \\
x &= C \sin \omega t \Rightarrow \dot{x} = C \omega \cos \omega t = C \omega \sqrt{1 - \frac{x^2}{C^2}} \\
\rho(x) &\propto \frac{1}{C \omega \sqrt{1 - \left(\frac{x}{C}\right)^2}}
\end{aligned}$$

d.h. die größte Dichte, sprich Aufenthaltswahrscheinlichkeit, herrscht an den Umkehrpunkten.  $\rho(x)$  divergiert dort sogar, denn  $x \rightarrow C \Rightarrow \rho(x) \rightarrow \infty$ .

- b) quantenmechanische Betrachtung:  
Die Wahrscheinlichkeit ist gegeben durch

$$\rho(x) = u^* u$$

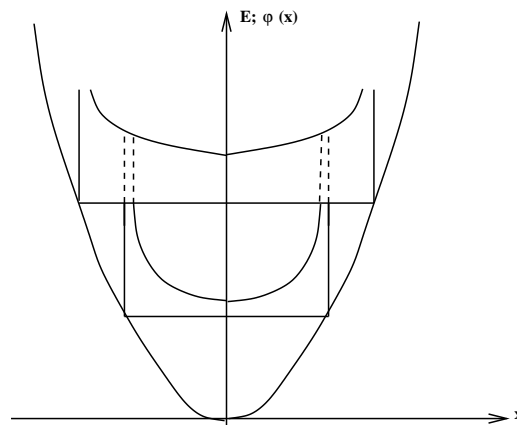


Abb. 2.12:

#### Beobachtung:

- Das Teilchen kann sich nach der quantenmechanischen Interpretation auch jenseits des klassischen Umkehrpunktes aufhalten (Tunneleffekt).

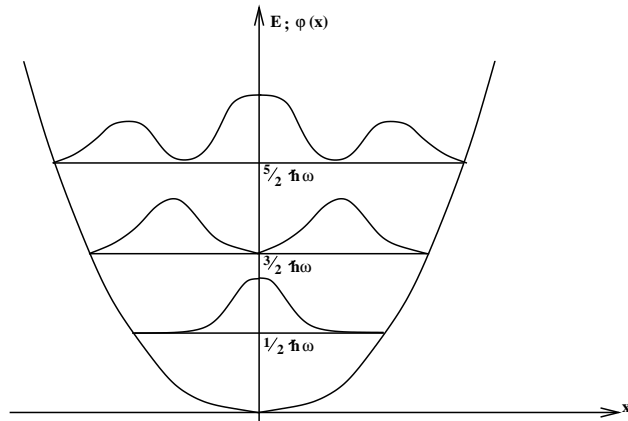


Abb. 2.13:

2. Die beiden Dichteverteilungen scheinen sich zu widersprechen. Mit der statistischen Interpretation der Quantenmechanik kann man jedoch einen Übergang schaffen, indem man annimmt, dass sehr viele Energiewerte mit extrem hohen Quantenzahlen besetzt sind, deren Verteilungen sich dann überlagern. Die Überlagerung wird dann gegen die klassische Verteilung konvergieren.