

Theoretische Physik in zwei Semestern II

Teil A: Quantenmechanik

Joachim Krug

Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln

E-mail: krug@thp.uni-koeln.de

1	Welle-Teilchen-Dualismus	3
1.1	Klassische Physik um 1900	3
1.2	Das Problem der Hohlraumstrahlung	4
1.3	Der photoelektrische Effekt	5
1.4	Impuls des Photons	6
1.5	Die Unschärferelation	6
1.6	Einschlussenergie und Stabilität der Atome	7
1.7	Doppelspaltexperimente	8
2	Die Schrödinger-Gleichung	10
2.1	Wellengleichung für Materiewellen	10
2.2	Wahrscheinlichkeitsinterpretation	11
2.3	Wellenpakete	13
2.3.1	Fourier-Transformation in einer Dimension.	13
2.3.2	Gauß'sches Wellenpaket und minimales Unschärfeprodukt.	14
2.3.3	Quantenmechanische Dispersion.	15
2.4	Schrödinger-Gleichung mit Potential	16
2.5	Stationäre Schrödinger-Gleichung	16
3	Der quantenmechanische Formalismus	18
3.1	Zustände	19
3.2	Operatoren	21
3.3	Vertauschungsrelationen	23
4	Eindimensionale Potentialprobleme	25
4.1	Potentialstufe	25
4.2	Tunneleffekt	28
4.2.1	Rechteckbarriere.	28
4.2.2	Allgemeine Potentialbarriere.	30

	2
4.2.3	Anwendung: Rastertunnelmikroskop. 30
4.3	Kastenpotential endlicher Tiefe 31
4.4	Der harmonische Oszillator 32
4.5	Zusammenfassung 37
5	Struktur der Atome 37
5.1	Quantenmechanik des Drehimpulses 38
5.1.1	Eigenwerte. 38
5.1.2	Eigenfunktionen. 40
5.2	Das Wasserstoffatom 41
5.2.1	Radiale Schrödinger-Gleichung. 41
5.2.2	Energiespektrum und Entartung. 42
5.2.3	Radiale Eigenfunktionen. 44
5.3	Spektrallinien und Atombau 44
5.3.1	Spektrallinien. 44
5.3.2	Schalenmodell des Atoms. 45
5.4	Streuzustände 45
6	Mehrteilchensysteme 46
6.1	Die Mehrteilchen-Wellenfunktion 46
6.2	Ununterscheidbarkeit 47
6.3	Pauli-Prinzip und statistische Wechselwirkung 50
6.4	Bell'sche Ungleichung 52
7	Relativistische Wellengleichungen 55
7.1	Klein-Gordon-Gleichung 55
7.2	Dirac-Gleichung 56
7.2.1	Spin. 57
7.2.2	Antiteilchen. 58

1. Welle-Teilchen-Dualismus

1.1. Klassische Physik um 1900

So long as *big* and *small* are merely relative concepts, it is no help to explain the big in terms of the small. It is therefore necessary to modify classical ideas in such a way as to give an absolute meaning to size. Paul Dirac (1930)[‡]

Zum Ende des 19. Jahrhunderts konnte sich das physikalische Weltbild auf drei gut etablierte Theoriegebäude stützen:

- Mechanik (Newton, Lagrange, Hamilton,...)
- Elektrodynamik (Faraday, Maxwell,...)
- Thermodynamik (Clausius, Boltzmann, Gibbs,...)

Einflussreiche Stimmen sahen eine baldige Vollendung der Physik, und damit ein Ende der physikalischen Forschung voraus. Allerdings liess die klassische Physik eine Reihe von Fragen unbeantwortet, z.B.

- die Struktur des Äthers
- die atomare Struktur der Materie; einerseits war die *Existenz* der Atome noch umstritten, andererseits gab es keine klassischen Modelle, die die *Stabilität* der Materie erklären konnten
- die diskreten Linienspektren bei der Emission und Absorption von Licht

Neben diesen (allgemein anerkannten) offenen Problemen gab es aber auch *innere Widersprüche* zwischen den verschiedenen Teilbereichen der klassischen Physik. Dies klar zu erkennen blieb besonders innovativen Geistern (wie vor allem Albert Einstein) vorbehalten. Die zentralen Widersprüche zeigten sich zwischen

- der Galilei-Invarianz der klassischen Mechanik und der Lorentz-Invarianz der Elektrodynamik; Einstein löste diesen Widerspruch in seiner speziellen Relativitätstheorie[§] durch Modifikation der klassischen Kinematik und Dynamik. Damit findet die Lichtgeschwindigkeit c als Grenzgeschwindigkeit Eingang in die Mechanik massiver Körper, und definiert einen *absoluten* Begriff von Geschwindigkeit. Die Frage nach der Struktur des Äthers wird überflüssig, da die Elektrodynamik kein ausgezeichnetes Bezugssystem mehr benötigt.
- der Thermodynamik und der Elektrodynamik in der *Ultraviolett Katastrophe*, die bei der statistischen Behandlung des Strahlungsfeldes auftritt. Max Planck konnte eine physikalisch konsistente Thermodynamik des Strahlungsfeldes nur entwickeln, indem er die Quantisierung der Feldenergie postulierte und das Wirkungsquantum \hbar als neue Naturkonstante einführte. Damit entsteht ein absoluter Begriff von Größe, und es wird verständlich, warum kleine Objekte (auf der atomaren Skala) sich

[‡] P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press 1930.

[§] A. Einstein, *Zur Elektrodynamik der bewegten Körper* (1905).

fundamental anders verhalten als große. In den folgenden Jahrzehnten entstand aus diesen Ansätzen die Quantentheorie, die schliesslich auch die offenen Fragen nach der Struktur und Stabilität der Materie beantwortete.

Wir können also sagen, dass sich die beiden Revolutionen der Physik des 20. Jahrhunderts gewissermassen an den inneren Widersprüchen der klassischen Physik entzündeten. Hier wird uns die zweite (und folgenreichere) Revolution beschäftigen, die zur Entwicklung der Quantentheorie geführt hat. Dazu soll zunächst das Problem der Ultraviolett katastrophe näher beleuchtet werden.

1.2. Das Problem der Hohlraumstrahlung

Gesucht ist die spektrale Energiedichte des elektromagnetischen Feldes bei einer gegebenen Temperatur T . Dazu stellt man sich vor, dass sich die Strahlung in einem Hohlraum befindet, dessen Wände die Temperatur T haben. Die Strahlung entweicht durch ein kleines Loch und kann spektral analysiert werden.

Die Energiedichte (= Energie pro Volumen) du in einem Frequenzintervall $(\omega, \omega + d\omega)$ ist

$$du = u(\omega, T)d\omega. \quad (1.1)$$

Aus thermodynamischen Überlegungen war bekannt, dass die Funktion $u(\omega, T)$ universell, also unabhängig von der genauen Beschaffenheit des Hohlraumes ist. Die integrale Energiedichte U genügt dem 1879 abgeleiteten Stefan-Boltzmann-Gesetz

$$U = \int_0^\infty d\omega u(\omega, T) = \sigma T^4. \quad (1.2)$$

Das Problem, dem Max Planck in seiner jahrzehntelangen Beschäftigung mit der Hohlraumstrahlung auf der Spur war^{||}, besteht nun darin, dass die konsequente Anwendung der Boltzmannschen statistischen Mechanik^ℙ auf das klassische elektromagnetische Feld notgedrungen auf das Rayleigh-Jeans-Gesetz

$$u(\omega, T) = \frac{k_B T \omega^2}{\pi^2 c^3} \quad (1.3)$$

führt⁺. Die Energiedichte würde demnach mit zunehmender Frequenz (abnehmender Wellenlänge) unbeschränkt zunehmen, und die integrale Energiedichte wäre für jede Temperatur unendlich. Da das Problem am kurzwelligen Ende des Spektrums auftritt, spricht man von der Ultraviolett katastrophe.

Angeleitet von theoretischen Überlegungen sowie von neuen experimentellen Daten, stellte Max Planck im Jahr 1900 sein Strahlungsgesetz

$$u(\omega, T) = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} \quad (1.4)$$

^{||} Zur historischen Entwicklung s. T.S. Kuhn, *Black-Body Theory and the Quantum Discontinuity, 1894-1912* (University of Chicago Press, 1987).

^ℙ Diese werden wir im zweiten Teil der Vorlesung kennenlernen; s. dazu Abschnitt 5.4 des Thermodynamik-Skripts.

⁺ $k_B = 1.3803 \times 10^{-23}$ J/K ist die Boltzmann-Konstante.

auf, und führte damit das Wirkungsquantum

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad (1.5)$$

in die Physik ein. Für kleine Frequenzen ($\hbar\omega \ll k_B T$) reduziert sich (1.4) auf das Rayleigh-Jeans-Gesetz (1.3), für grosse Frequenzen wird die Energiedichte durch den exponentiellen Term im Nenner unterdrückt. Die integrale Energiedichte bleibt so endlich und man erhält einen expliziten Ausdruck für die Konstante σ im Stefan-Boltzmann-Gesetz (1.2). Das Maximum der Energiedichte liegt bei einer Frequenz ω_{\max} , die durch

$$\hbar\omega_{\max} \approx 2.18 k_B T \quad (1.6)$$

bestimmt ist. Diese Beziehung legt die Farbe glühender Objekte fest: Bei Zimmertemperatur befindet sich das Maximum bei einer Wellenlänge von etwa $17 \mu\text{m}$, also tief im Infraroten, während die Oberfläche der Sonne bei $T = 5800 \text{ K}$ im sichtbaren Bereich glüht. Man kann also (etwas verkürzt) sagen, dass der Wert von \hbar erklärt, warum die Dinge in unserer Umgebung im Dunkeln nicht (sichtbar) leuchten.

Zur Herleitung von (1.4) musste Planck annehmen, dass die elektromagnetische Feldenergie nur in Quanten der Grösse

$$E = \hbar\omega = h\nu \quad (\nu = \omega/2\pi) \quad (1.7)$$

ausgetauscht werden kann. Es war zunächst nicht ganz klar, ob es sich hierbei nur um einen mathematischen Trick handelte, der sich durch einen geeigneten Grenzübergang am Ende der Rechnung wieder eliminieren liesse. Erst Einstein* erkannte 1905 die ganze Tragweite der Planckschen *Quantenhypothese* (1.7), und machte sie zur Erklärung anderer physikalischer Phänomene nutzbar.

1.3. Der photoelektrische Effekt

Beim photoelektrischen Effekt werden durch elektromagnetische Bestrahlung Elektronen aus einer Metalloberfläche herausgelöst. Der Effekt wurde 1887 von Heinrich Hertz entdeckt, und von Philipp Lenard quantitativ untersucht, der 1905 dafür den Nobelpreis erhielt. Die (aus klassischer Sicht) überraschende Beobachtung war, dass die kinetische Energie der ausgelösten Photoelektronen unabhängig von der Intensität des Lichtes ist, aber von der Frequenz über eine lineare Beziehung

$$E_{\text{kin}} = \hbar\omega - W \quad (1.8)$$

abhängt. Einstein zeigte 1905, dass die Quantenhypothese dieses Verhalten zwanglos erklärt: Jedes Lichtquant kann ein Elektron heraus schlagen, aber nur, wenn seine Energie die Austrittsarbeit W des Metalls übersteigt; die restliche Energie teilt sich dann dem Elektron als kinetische Energie mit. Erhöht man die Intensität der Strahlung erhöht sich die Zahl der Lichtquanten, und damit auch die Zahl der Photoelektronen, nicht aber deren Energie.

* A. Einstein, *Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt* (1905).

1.4. Impuls des Photons

Die Quantenhypothese (1.7) deutet auf eine gewisse Körnigkeit des Strahlungsfeldes hin, und legt es nahe, die Lichtquanten als Teilchen zu betrachten. Einstein schlug 1916 vor, diesen hypothetischen Teilchen neben der Energie (1.7) auch einen Impuls zuzuordnen. Ausgangspunkt ist die Energie-Impuls-Beziehung für relativistische Teilchen,

$$E = c\sqrt{|\vec{p}|^2 + m^2c^2}. \quad (1.9)$$

Vertraute Spezialfälle sind $E = mc^2$ für ein ruhendes Teilchen, und

$$E \approx mc^2 + \frac{|\vec{p}|^2}{2m} \quad (1.10)$$

im nichtrelativistischen Grenzfall, $|\vec{p}|/m \ll c$. Lichtquanten bewegen sich mit Lichtgeschwindigkeit und müssen deshalb masselos sein. Mit $m = 0$ reduziert sich (1.9) auf $E = c|\vec{p}|$, und durch Kombination mit (1.7) schliessen wir, dass der Impuls des Lichtquants den Wert

$$|\vec{p}| = E/c = \hbar\omega/c = \hbar|\vec{k}| \quad (1.11)$$

haben muss, wobei \vec{k} den *Wellenvektor* der zugehörigen monochromatischen ebenen Welle

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i[\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega(\vec{k})t]} + \text{kompl. konj.}, \quad \omega(\vec{k}) = c|\vec{k}| \quad (1.12)$$

bezeichnet. Die Wellenlänge ist $\lambda = 2\pi/|\vec{k}|$. Da der Impuls des Lichtquants, wie der Wellenvektor, in die Ausbreitungsrichtung der Welle zeigen sollte, folgt

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}. \quad (1.13)$$

Zusammen ordnen die Beziehungen (1.7) und (1.13) der ebenen Welle (1.12) Teilchen mit Energie und Impuls zu, die nach einem Vorschlag von Lewis (1926) *Photonen* genannt werden.

Eine unmittelbare Folge dieser Sichtweise ist der 1923 gefundene *Compton-Effekt*. Hierbei handelt es sich um einen Stoss zwischen einem Elektron und einem Photon. Beobachtet wird die Verschiebung $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ der Wellenlänge des Photons. Bei einem Streuwinkel θ [Winkel zwischen einfallendem (\vec{k}) und gestreutem (\vec{k}') Wellenvektor] und einem anfangs ruhenden Elektron findet man

$$\Delta\lambda = \lambda_c [1 - \cos(\theta)], \quad (1.14)$$

mit der *Compton-Wellenlänge* $\lambda_c = h/mc = 2.4 \times 10^{-12}\text{m}$. Die Beziehung (1.14) folgt aus der Erhaltung von (relativistischer) Energie und (relativistischem) Impuls für das Gesamtsystem.

1.5. Die Unschärferelation

Einem Argument von Heisenberg folgend, können wir aus dem Teilchencharakter des Lichts bereits eine erste, sehr vorläufige Version der Unschärferelation zwischen Ort und

Impuls herleiten[‡]. Wir möchten ein Teilchen (z.B. ein Elektron) mit einem Mikroskop beobachten, und seinen Ort mit einer räumlichen Auflösung Δx festlegen. Nach den Abbildungsprinzipien der Optik muss die Wellenlänge λ der verwendeten Strahlung kleiner sein als Δx . Da zur Beobachtung mindestens ein Photon mit dem Teilchen wechselwirken muss, kommt es zwangsläufig zu einem Impulsübertrag

$$\Delta p \approx h/\lambda > h/\Delta x, \quad (1.15)$$

der den Impuls des Teilchens um den gleichen Betrag unkontrolliert verändert. Der Impulsübertrag ist umso grösser, je genauer das Teilchen lokalisiert werden soll, und das Produkt von Impulsübertrag und räumlicher Auflösung erfüllt die Ungleichung

$$\Delta x \Delta p > h. \quad (1.16)$$

Dies ist eine sehr vorläufige Version der Unschärferelation, zumal wir an dieser Stelle die Grössen Δx und Δp noch nicht präzise definieren können. Das wird in Abschnitt 2.3 nachgeholt.

1.6. Einschlussenergie und Stabilität der Atome

Auch die Überlegungen in diesem Abschnitt haben einen vorläufigen Charakter, wir werden sie in Abschnitt 2.5 präzisieren. Ausgangspunkt ist die Beobachtung, dass die durch die Unschärferelation geforderte Impulsunschärfe gleichzeitig eine untere Schranke an die kinetische Energie des Teilchens impliziert, denn ein ruhendes Teilchen hätte den scharfen Impulswert $p = 0$. Daraus folgt bereits qualitativ die Stabilität der Atome: Würde das Elektron (wie klassisch vorhergesagt) in den Kern stürzen, hätten sowohl sein Ort als auch sein Impuls einen scharfen Wert, was der Unschärferelation widerspricht.

Um dieses Argument zu quantifizieren, können wir die Unschärferelation wie folgt uminterpretieren:

Wird ein Quantenteilchen auf einen Raumbereich der Grösse Δx eingeschränkt, so beträgt seine kinetische Energie E_{kin} mindestens[†]

$$E_{\text{kin}} \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \equiv E_{\text{Einschluss}}. \quad (1.17)$$

Als Anwendung leiten wir eine Abschätzung für die Ausdehnung des Wasserstoffatoms her. Die Energie $E(r)$ des Elektrons im Abstand r vom Kern sei gegeben durch die Summe aus Coulomb-Energie[‡] und Einschlussenergie, wobei wir die Einschlusslänge Δx mit r identifizieren:

$$E(r) \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r}. \quad (1.18)$$

Für grosse Abstände dominiert die attraktive Coulomb-Wechselwirkung, für kleine Abstände die repulsive Einschlussenergie. Dazwischen findet sich ein Minimum, und

[‡] W. Heisenberg, *Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie* (1930).

[†] Hier wurde die Unschärferelation in der Form $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ benutzt.

[‡] Im cgs-System.

zwar beim Abstand $r_0 = \hbar^2/me^2 \approx 0.53 \text{ \AA}$. Die zugehörige Energie ist $E(r_0) = -e^2/2r_0 \approx -13.6 \text{ eV}$.

Durch eine glückliche Wahl der Konstanten in den Beziehungen (1.17) und (1.18) haben wir sogar die exakten Ausdrücke für den Bohr'schen Radius r_0 und die Grundzustandsenergie E_0 des Wasserstoffatoms erhalten (s. Abschnitt 5.2). Dem ist keine tiefe Bedeutung zuzumessen; wichtiger ist, dass die Grössenordnungen richtig herauskommen, und dass der Begriff der Einschlussenergie einen ersten intuitiven Eindruck vom Verhalten von Quantensystemen liefert.

1.7. Doppelspaltexperimente

It contains the only mystery, the basic peculiarities of all of quantum mechanics.
Richard Feynman

Wir kehren jetzt zum Hauptstrang der Argumentation zurück, den wir in Abschnitt 1.4 verlassen hatten. In den Abschnitten 1.2 – 1.4 hatten wir experimentelle Hinweise auf den *Teilchencharakter* von elektromagnetischer Strahlung zusammengetragen. Dies ist kein neuer Gedanke – schon Newton war Anhänger einer Korpuskulartheorie des Lichtes, die allerdings später aufgrund der Interferenzexperimente von Huygens, Young und anderen durch die Vorstellung von der Wellennatur des Lichtes ersetzt wurde.

Wir müssen uns an dieser Stelle klarmachen, warum und in welcher Weise Wellenbild und Teilchenbild einander widersprechen. Wir betrachten dazu das klassische Young'sche Doppelspaltexperiment: Ein Teilchenstrahl oder eine ebene Welle fällt auf zwei Spalte 1 und 2, und das resultierende Intensitätsmuster wird auf einem Schirm hinter der Ebene der Spalte als Funktion der Koordinate x senkrecht zur Einfallrichtung aufgenommen. Wir unterscheiden drei Fälle:

- (i) Spalt 1 auf, Spalt 2 geschlossen \Rightarrow Intensitätsmuster $I_1(x)$
- (ii) Spalt 2 auf, Spalt 1 geschlossen \Rightarrow Intensitätsmuster $I_2(x)$
- (iii) beide Spalte offen \Rightarrow Intensitätsmuster $I(x)$

Bei einem *klassischen Teilchenstrahl* (z.B. ein dünner Sandstrahl, der durch die Spalte rieselt) lässt sich für jedes Teilchen, das auf dem Schirm auftrifft, eindeutig sagen, durch welchen der beiden Spalte es gekommen ist. Sofern die Teilchen sich nicht beeinflussen, wird jedes Teilchen, das im Fall (i) oder (ii) auf dem Schirm nachgewiesen wurde, deshalb auch im Fall (iii) *an der gleichen Stelle* auftreffen. Es folgt, dass die Intensitäten sich addieren:

$$I(x) = I_1(x) + I_2(x). \quad (1.19)$$

Bei einer *klassischen Welle* hingegen überlagern sich im Fall (iii) die *Amplituden* $A_1(x)$ und $A_2(x)$ der Elementarwellen, die von den beiden Spalten ausgehen. Die Amplituden addieren sich auf dem Schirm,

$$A(x) = A_1(x) + A_2(x). \quad (1.20)$$

Je nach Gangunterschied kommt es zu konstruktiver oder destruktiver Interferenz zwischen den Spalten. Deshalb addieren sich die Intensitäten *nicht*, sondern es gilt

$$I(x) = |A(x)|^2 \neq |A_1(x)|^2 + |A_2(x)|^2 = I_1(x) + I_2(x). \quad (1.21)$$

Nun macht sich der Teilchencharakter des Lichts in diesem Experiment erst bei sehr kleinen Intensitäten bemerkbar, wenn die Einschlagereignisse einzelner Photonen auf dem Schirm nachweisbar werden. Man könnte sich deshalb im Prinzip vorstellen, dass das Interferenzmuster nur bei höheren Intensitäten durch eine irgendwie geartete Wechselwirkung zwischen den Photonen zustandekommt, und man im Grenzfall geringer Intensität das klassische Teilchenbild wiederfindet.

Dass diese Vorstellung falsch ist, zeigen *Interferenzexperimente mit einzelnen Photonen*[†]. Durch eine geeignete Wahl der Lichtquelle ist es möglich, sicherzustellen, dass sich zu jedem Zeitpunkt nur ein einzelnes Photon im Strahlengang befindet. Trotzdem bilden die einzelnen Nachweisereignisse nach entsprechender Mittelung das im Wellenbild vorhergesagte Interferenzmuster. Die Ergebnisse solcher Experimente lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Interferenz beruht nicht auf dem Zusammenwirken verschiedener Photonen; vielmehr interferiert jedes Photon "mit sich selbst".
- Das Interferenzmuster baut sich aus einzelnen Nachweisereignissen auf.
- Wird der Durchgang des Photons durch einen der beiden Spalte nachgewiesen, so verschwindet das Interferenzmuster.

Diese Aussagen bilden den Kern des Welle-Teilchen-Dualismus, denn sie zeigen, dass das Licht zwar als Teilchen am Schirm nachgewiesen wird, sich aber als Welle durch die Spalte bewegt. Es ist nicht möglich, für ein einzelnes, auf dem Schirm auftreffendes Photon festzustellen, durch welchen Spalt es gekommen ist; versucht man diese Festlegung, gehen die Welleneigenschaften verloren.

Wie wir im folgenden Kapitel sehen werden, ist der Welle-Teilchen-Dualismus nicht auf Photonen beschränkt; auch massenbehaftete Teilchen zeigen Welleneigenschaften. Einige wichtige Interferenzexperimente mit massiven Teilchen sind im folgenden aufgelistet:

- Elektronen (Davisson & Germer, 1927; Nobelpreis 1937)
- Atome und kleine Moleküle (Estermann & Stern, 1930)
- Neutronen (v. Halban & Preiswerk, 1936)
- C₆₀-Moleküle, Biomoleküle (Zeilinger und Mitarbeiter, seit 1999[‡])

[†] Z.B. P. Grangier, G. Roger, A. Aspect, *Experimental Evidence for a Photon Anticorrelation Effect on a Beam Splitter: A New Light on Single-Photon Interferences*, Europhysics Letters **1**, 173 (1986).

[‡] S. dazu den Artikel *Interferometrie mit komplexen Molekülen* von M. Arndt, S. Gerlich, K. Hornberger und M. Mayor auf der Vorlesungs-Homepage.

Wir müssen uns somit der Herausforderung stellen, einen konsistenten mathematischen Formalismus zur Beschreibung von Quantenobjekten mit Wellen- und Teilcheneigenschaften zu entwickeln. Wie das gehen könnte, erkennt man anhand der besprochenen Einzelphotonenexperimente:

- (i) Die Welleneigenschaften werden beschrieben durch die Wellengleichung[§]

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \vec{E}(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.22)$$

für elektromagnetische Strahlung im Vakuum.

- (ii) Die Intensität $I(\vec{r}, t) \sim |\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$ der Strahlung wird interpretiert als *Nachweiswahrscheinlichkeit* für ein Photon am Ort \vec{r} zur Zeit t .

Teil (ii) führt ein radikal neues, zufälliges Element in die Theorie ein; die Auflösung des Widerspruchs zwischen Wellen- und Teilchenbild durch die Quantentheorie geht *auf Kosten des klassischen Determinismus*.

2. Die Schrödinger-Gleichung

2.1. Wellengleichung für Materiewellen

Louis de Broglie hat 1923 vorgeschlagen, durch Umkehrung der Planck-Einstein'schen Beziehungen (1.7) und (1.13) auch massiven Teilchen Welleneigenschaften zuzuordnen. Frequenz ω und Wellenvektor \vec{k} einer Materiewelle aus Teilchen mit Energie E und Impuls \vec{p} ergeben sich damit zu

$$\omega = E/\hbar, \quad \vec{k} = \vec{p}/\hbar. \quad (2.1)$$

Für ein freies, nichtrelativistisches Teilchen lautet die Energie-Impuls-Beziehung[†] $E = E_{\text{kin}} = |\vec{p}|^2/2m$. Die *Dispersionsrelation* der Materiewelle, also die Beziehung zwischen Frequenz und Wellenvektor, ergibt sich damit zu

$$\omega(\vec{k}) = \frac{\hbar |\vec{k}|^2}{2m}. \quad (2.2)$$

Wie können wir eine Wellengleichung konstruieren, die die gewünschte Dispersionsrelation (2.2) besitzt? Der umgekehrte Weg von der Wellengleichung zur Dispersionsrelation ist aus der Elektrodynamik bekannt: Zur Lösung der elektromagnetischen Wellengleichung (1.22) macht man den Ansatz (1.12) einer ebenen Welle, und erhält die Bedingung $\omega^2 = c^2 |\vec{k}|^2$, also die Dispersionsrelation $\omega(\vec{k}) = c |\vec{k}|$ für elektromagnetische Strahlung. Die Ableitung der ebenen Welle nach der Zeit entspricht einer Multiplikation mit $-i\omega$, die Bildung des Gradienten einer Multiplikation mit $i\vec{k}$. Zusammen mit den de Broglie'schen Beziehungen (2.1) gelten somit die folgenden Entsprechungen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow -i\omega \rightarrow -iE/\hbar, \quad \nabla \rightarrow i\vec{k} \rightarrow i\vec{p}/\hbar. \quad (2.3)$$

[§] $\nabla^2 = \Delta = \text{div} \cdot \text{grad}$.

[†] Vgl. mit (1.10); wir verschieben hier den Energie-Nullpunkt so, dass die Ruhenergie mc^2 verschwindet.

Die Umkehrung liefert die wichtigen *quantenmechanischen Ersetzungsregeln*, die den klassischen Grössen Energie und Impuls Differentialoperatoren zuordnen:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (2.4)$$

Damit können wir die Energie-Impulsrelation $E = |\vec{p}|^2/2m$ in eine Gleichung von Operatoren übersetzen, die auf eine *Wellenfunktion* $\psi(\vec{r}, t)$ wirken, und erhalten die *freie Schrödingergleichung*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi. \quad (2.5)$$

Die physikalische Bedeutung der Wellenfunktion wird im folgenden Abschnitt erläutert. Wir sehen aber schon an dem Faktor i auf der linken Seite, dass ψ i.a. eine komplexwertige Funktion ist.

2.2. Wahrscheinlichkeitsinterpretation

Wir hatten bereits in Abschnitt 1.7 gesehen, dass eine konsistente Beschreibung von Wellen- und Teilcheneigenschaften ein zufälliges Element beinhaltet - die *Intensität* der interferierenden Welle muss als Nachweiswahrscheinlichkeit für Teilchen interpretiert werden. Für die quantenmechanische Wellenfunktion ψ wurde diese *Wahrscheinlichkeitsinterpretation* 1926 von Max Born zuerst formuliert:

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ ist die *Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte* des durch ψ beschriebenen Teilchens, das heisst: Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem infinitesimalen Volumenelement d^3r um den Punkt \vec{r} zur Zeit t anzutreffen ist $|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$, und die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem endlichen Volumen Ω anzutreffen ist

$$\int_{\Omega} d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2. \quad (2.6)$$

ψ heisst deshalb auch *Wahrscheinlichkeitsamplitude*.

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation stellt zwei Konsistenzbedingungen an die Wellenfunktion und an die Struktur der Wellengleichung.

(i) *Normierung*. Führt man das Integral (2.6) über den gesamten dem Teilchen verfügbaren Raum aus muss 1 herauskommen, denn das Teilchen befindet sich mit Sicherheit irgendwo:

$$\int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = 1. \quad (2.7)$$

Sofern der verfügbare Raum unbeschränkt ist, muss die Wellenfunktion im Unendlichen hinreichend schnell abfallen, damit das Integral existiert. Eine solche Wellenfunktion heisst *normierbar*. Für eine normierbare Wellenfunktion kann die Bedingung (2.7) stets durch Multiplikation mit einer geeigneten Konstante erreicht werden; die Wellenfunktion ist dann *normiert*.

Als Beispiel einer räumlichen Wahrscheinlichkeitsverteilung in einer Dimension betrachten wir eine Gauß-Funktion mit Mittelwert x_0 und Varianz σ_0^2 ,

$$|\psi_G(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma_0^2}. \quad (2.8)$$

Die Funktion ist normiert,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_G(x)|^2 = 1. \quad (2.9)$$

Der Mittel- oder *Erwartungswert* des Ortes ist

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi_G(x)|^2 = x_0, \quad (2.10)$$

und die *Varianz* (= mittlere quadratische Abweichung vom Mittelwert) ist

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx (x - x_0)^2 |\psi_G(x)|^2 = \sigma_0^2. \quad (2.11)$$

Wir können jetzt auch den Begriff der Ortsunschärfe präzisieren, und identifizieren Δx mit der *Standardabweichung* des Ortes,

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}. \quad (2.12)$$

Die Wellenfunktion $\psi_G(x)$ erhalten wir[‡], indem wir einfach die Wurzel aus (2.8) ziehen,

$$\psi_G(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_0^2)^{1/4}} e^{-(x-x_0)^2/4\sigma_0^2}. \quad (2.13)$$

(ii) *Erhaltung der Wahrscheinlichkeit.* Die Normierungsbedingung (2.7) muss im Laufe der Zeit erhalten bleiben, d.h. es muss gelten

$$\frac{d}{dt} \int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \int d^3r \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) = 0. \quad (2.14)$$

Durch Einsetzen von (2.5) und der komplex konjugierten Gleichung für ψ^* folgt

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*] = -\nabla \cdot \vec{J}_\psi, \quad (2.15)$$

wobei der *Wahrscheinlichkeitsstrom* \vec{J}_ψ definiert ist durch

$$\vec{J}_\psi = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \Im[\psi^* \nabla \psi]. \quad (2.16)$$

Der Wahrscheinlichkeitstrom verschwindet für jedes reelle ψ ; reelle Wellenfunktionen können deshalb nur zur Beschreibung von zeitunabhängigen (*stationären*) Situationen benutzt werden.

Bezeichnen wir die zur Wellenfunktion ψ gehörige Wahrscheinlichkeitsdichte mit $\rho_\psi \equiv |\psi|^2$, so erfüllt diese somit die *Kontinuitätsgleichung*,

$$\frac{\partial \rho_\psi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_\psi = 0. \quad (2.17)$$

[‡] Bis auf einen komplexen Phasenfaktor vom Betrag 1, der, wie wir noch sehen werden, die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Impulses beeinflusst.

Wie jede Grösse, die einer Kontinuitätsgleichung genügt (z.B. die elektrische Ladungsdichte oder die Massendichte einer Flüssigkeit) ist ρ_ψ *lokal erhalten*: Integration von (2.17) über ein beliebiges Teilvolumen Ω liefert nach Anwendung des Gauss'schen Satzes

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 = - \int_{\Omega} d^3r \nabla \cdot \vec{J}_\psi = \int_{\partial\Omega} d^2\vec{f} \cdot \vec{J}_\psi, \quad (2.18)$$

d.h. die Wahrscheinlichkeit (2.6), das Teilchen im Volumen Ω zu finden, ändert sich nur aufgrund der Wahrscheinlichkeitsströme durch die Oberfläche $\partial\Omega$ des Volumens; im Inneren des Volumens kann die Wahrscheinlichkeitsdichte weder erzeugt noch vernichtet werden. Umfasst das Integral in (2.18) den gesamten verfügbaren Raum, so verschwindet das Oberflächeintegral und (2.14) ist erfüllt.

2.3. Wellenpakete

The main object of physical science is not the provision of pictures, but is the formulation of laws governing phenomena and the application of these laws to the discovery of new phenomena. If a picture exists, so much the better; but whether a picture exists or not is a matter of only secondary importance. Paul Dirac (1930)

Bislang haben wir als Lösungen der freien Schrödinger-Gleichung (2.5) nur ebene Wellen von der Form

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i[\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})t]} \quad (2.19)$$

kennengelernt, mit $\omega(\vec{k})$ gemäss (2.2). Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{\psi_{\vec{k}}} = |\psi_0|^2$ ist räumlich konstant: Das Teilchen befindet sich mit gleicher Wahrscheinlichkeit an jedem Ort. Das ist konsistent mit der Unschärferelation, denn die ebene Welle (2.19) hat einen scharf definierten Impuls $\vec{p} = \hbar\vec{k}$; es gilt also $\Delta p = 0$, sodass gemäß (1.16) die räumliche Unschärfe $\Delta x = \infty$ sein muss.

Um Lösungen zu erhalten, die eher der klassischen Vorstellung einer räumlich lokalisierten Wahrscheinlichkeitsdichte entsprechen, müssen wir viele ebene Wellen zu einem *Wellenpaket* überlagern:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3r A(\vec{k}) e^{i[\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})t]}. \quad (2.20)$$

Dass dies für beliebige Funktionen $A(\vec{k})$ eine Lösung von (2.5) darstellt, liegt an der Linearität von (2.5) und dem damit verbundenen *Superpositionsprinzip*, das besagt, dass jede Linearkombination von Lösungen wieder eine Lösung ist (s. Abschnitt 3.1). In den folgenden Abschnitten betrachten wir eindimensionale Wellenpakete.

2.3.1. Fourier-Transformation in einer Dimension. Bevor wir ein konkretes Beispiel eines Wellenpakets betrachten, stellen wir einige nützliche Tatsachen über die

eindimensionale Fourier-Transformation zusammen§. Die Fourier-Transformierte (FT) $\hat{\psi}(k)$ einer eindimensionalen Wellenfunktion $\psi(x)$ ist definiert durch

$$\hat{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x) e^{-ikx}, \quad (2.21)$$

und die Umkehrtransformation lautet

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{\psi}(k) e^{ikx}. \quad (2.22)$$

Zum Beweis benutzt man die Beziehung

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-x')} = \delta(x-x'). \quad (2.23)$$

Gleichung (2.22) ist nichts anderes als die Zerlegung von $\psi(x)$ in ebene Wellen. Da die Zeitentwicklung einer ebenen Welle unter der freien Schrödinger-Gleichung bekannt ist, können wir damit sofort die allgemeine Lösung in einer Dimension aufschreiben. Es gilt

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \hat{\psi}(k) e^{i[kx - \omega(k)t]}, \quad (2.24)$$

wobei $\hat{\psi}(k)$ die FT der Anfangsbedingung $\psi(x, 0)$ ist.

2.3.2. Gauß'sches Wellenpaket und minimales Unschärfeprodukt. Wir wenden das oben skizzierte Verfahren zur Lösung der eindimensionalen freien Schrödinger-Gleichung an auf das durch (2.8) definierte Gauß'sche Wellenpaket. Die FT der Wellenfunktion (2.13) ist||

$$\hat{\psi}_G(k) = \left(\frac{2\sigma_0^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-ikx_0 - \sigma_0^2 k^2}. \quad (2.25)$$

So wie $|\psi_G(x)|^2$ die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Ortes darstellt, kann $|\hat{\psi}_G(k)|^2$ als *Wahrscheinlichkeitsverteilung der Wellenzahl k* aufgefasst werden \mathbb{P} . Die Verteilung ist

$$|\hat{\psi}_G(k)|^2 = \sqrt{\frac{2\sigma_0^2}{\pi}} e^{-2\sigma_0^2 k^2}, \quad (2.26)$$

also wieder eine Gauß-Verteilung mit Mittelwert⁺ $\langle k \rangle = 0$ und Varianz

$$\langle k^2 \rangle = \frac{1}{4\sigma_0^2} \Rightarrow \Delta k = \frac{1}{2\sigma_0} = \frac{1}{2\Delta x}. \quad (2.27)$$

Das Produkt der Standardabweichungen von Ort und Wellenzahl ist somit

$$\Delta x \Delta k = \frac{1}{2} \quad (2.28)$$

§ Eine gute Zusammenfassung dieser Thematik findet sich im Anhang A des Buches *Quantenphysik* von S. Gasiorowicz (Oldenbourg, 1977).

|| Die Rechnung wird in den Übungen genauer erläutert.

\mathbb{P} Man rechnet leicht nach, daß $|\hat{\psi}(k)|^2$ genau dann normiert ist, wenn dies auch für $|\psi(x)|^2$ gilt.

⁺ Um eine Verteilung mit nichtverschwindendem Mittelwert k_0 zu erhalten (entsprechend einem mittleren Teilchenimpuls $\hbar k_0$) muß man lediglich die Wellenfunktion $\psi_G(x)$ mit dem Phasenfaktor $e^{ik_0 x}$ multiplizieren.

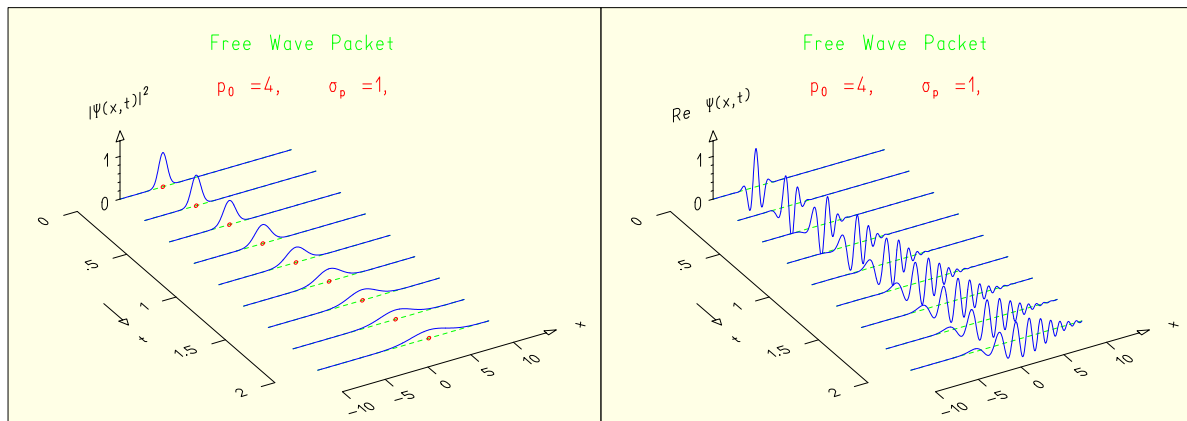


Abbildung 1. Dispersion eines Gaußschen Wellenpakets. Das linke Bild zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$, das rechte den Realteil der Wellenfunktion. Das Wellenpaket bewegt sich mit konstanter Geschwindigkeit nach rechts; der rote Punkt auf dem linken Bild zeigt die Bewegung des Erwartungswerts. Die Bilder wurden erzeugt mit dem Programm INTERQUANTA (S. Brandt, H.D. Dahmen, T. Stroh, *Interactive Quantum Mechanics*, Springer 2003).

unabhängig von σ_0^2 . Wie wir in Abschnitt 3.3 sehen werden, ist das tatsächlich der minimale Wert, den dieses Produkt für irgendeine Wellenfunktion annehmen kann; allgemein gilt $\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$. Aus der Beziehung $p = \hbar k$ zwischen Wellenzahl und Impuls folgt dann

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \quad (2.29)$$

für das Gauss'sche Wellenpaket, und $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ für allgemeine Wellenfunktionen.

2.3.3. Quantenmechanische Dispersion. Die zeitabhängige Lösung der freien Schrödingergleichung mit Anfangsbedingung (2.13) erhalten wir, indem wir (2.26) in (2.24) einsetzen. Wie in den Übungen gezeigt wird, ist die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte wieder ein Gauss-Paket,

$$|\psi_G(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma(t)^2}} e^{-x^2/2\sigma^2(t)}, \quad (2.30)$$

mit der zeitabhängigen Standardabweichung (oder Ortsunschärfe)

$$\sigma(t) = \sigma_0 \sqrt{1 + (t/\tau)^2} \quad (2.31)$$

und der charakteristischen Zeit $\tau = 2\sigma_0^2 m/\hbar$. Die anfängliche Unschärfe σ_0 bleibt für kurze Zeiten ($t \ll \tau$) erhalten, aber für lange Zeiten ($t \gg \tau$) läuft das Wellenpaket linear auseinander (s. Abb. 1).

Dieses Phänomen der *quantenmechanischen Dispersion* lässt sich leicht verstehen: Gemäss (2.29) besitzt das Wellenpaket anfänglich eine Impulsunschärfe $\Delta p = \hbar/2\sigma_0$. Da die Bewegung kräftefrei ist, bleibt diese auch zu allen Zeiten erhalten; die Impulsverteilung hängt nicht von der Zeit ab. Die entsprechende

Geschwindigkeitsunschärfe $\Delta v = \Delta p/m$ führt deshalb zu einer zusätzlichen Ortsunschärfe $\Delta v \cdot t$.

2.4. Schrödinger-Gleichung mit Potential

Zur Behandlung der Bewegung in Gegenwart von Kräften muss die freie Schrödinger-Gleichung erweitert werden. Wir betrachten zunächst wieder eine ebene Welle $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$, s. (2.19). Die Energie ist rein kinetisch, $E = \hbar\omega = E_{\text{kin}} = \frac{\hbar^2|\vec{k}|^2}{2m}$. Wenn das Teilchen sich in einem *konstanten* Potential $V(\vec{r}) \equiv V_0$ bewegt, ist die ebene Welle nach wie vor eine Lösung*, die Energie sollte sich aber um V_0 verschieben, zu $E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2|\vec{k}|^2}{2m} + V_0$. Dies können wir erreichen, indem wir die freie Schrödinger-Gleichung (2.5) auf der rechten Seite um den Term $V_0\psi$ erweitern. Wir postulieren nun, daß diese Modifikation auch für räumlich veränderliche Potentiale richtig ist, und erhalten die (volle) *Schrödinger-Gleichung*

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\vec{r})\psi. \quad (2.32)$$

Daß diese Wahl vernünftig ist, zeigt auch das in den Übungen behandelte *Ehrenfest'sche Theorem*; es besagt, daß die Bewegung eines Wellenpakets unter der Schrödinger-Dynamik (2.32) näherungsweise der Bahn eines Newton'schen Massenpunktes folgt.

2.5. Stationäre Schrödinger-Gleichung

In Gegenwart von äusseren Kräften ist der Impuls eines Teilchens nicht erhalten; im Rahmen der Quantenmechanik bedeutet das, daß ebene Wellen keine Lösungen der vollen Schrödinger-Gleichung (2.32) mehr sind. Sofern die Kräfte konservativ sind (und nur dieser Fall wird hier betrachtet) ist aber die Energie erhalten, und es ist sinnvoll, nach Lösungen zu einer festen Energie E bzw. festen Frequenz $\omega = E/\hbar$ zu suchen. Wir machen deshalb den Ansatz

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{-i\omega t} u(\vec{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} u(\vec{r}) \quad (2.33)$$

mit einer zeitunabhängigen Funktion $u(\vec{r})$. Die Wahrscheinlichkeitsdichte zu (2.33) ist $|\psi|^2 = |u|^2$ und ebenfalls zeitunabhängig; der Ansatz (2.33) beschreibt eine *stationäre* Situation.

Einsetzen in (2.32) und Kürzen des gemeinsamen Phasenfaktors $e^{-i\omega t}$ auf beiden Seiten führt auf die *stationäre Schrödinger-Gleichung*

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] u(\vec{r}) = \hat{H}u(\vec{r}) = Eu(\vec{r}), \quad (2.34)$$

für $u(\vec{r})$, wobei im zweiten Schritt der *Hamilton-Operator*

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (2.35)$$

definiert wurde. Die Gleichung (2.34) hat die Struktur eines *Eigenwertproblems*:

* Tatsächlich wirken in diesem Fall ja keine Kräfte, sodaß der Impuls $\hbar\vec{k}$ erhalten ist.

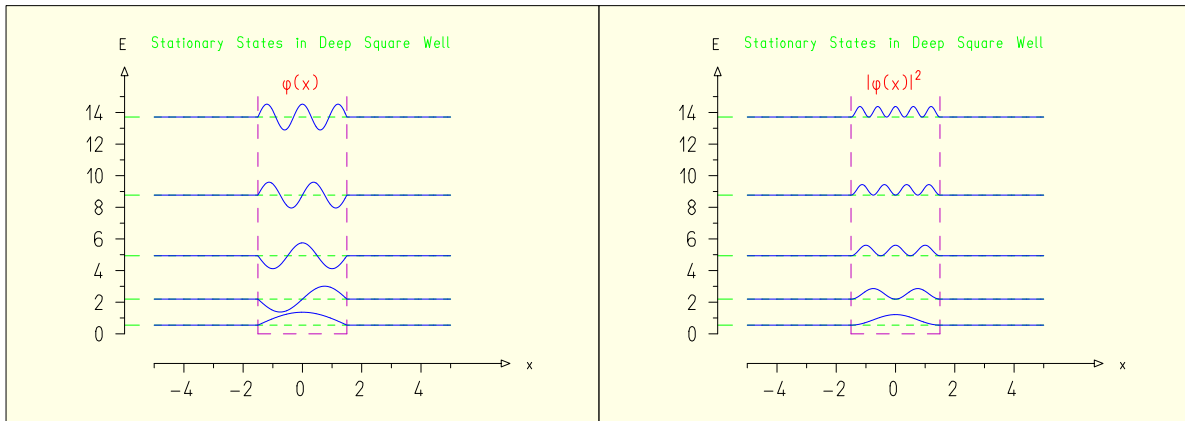


Abbildung 2. Eigenfunktionen im eindimensionalen Kastenpotential. Das linke Bild zeigt die Eigenfunktionen $u_n(x)$ mit $n = 1 - 5$, das rechte die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten $|u_n(x)|^2$. Die Eigenfunktion $u_n(x)$ hat $n - 1$ Nullstellen im Inneren des Kastens ('Knoten'). Die vertikale Anordnung der Grundlinien der Graphen von $u_n(x)$ und $|u_n(x)|^2$ folgt den Energieeigenwerten E_n . Die Bilder wurden erzeugt mit dem Programm INTERQUANTA (S. Brandt, H.D. Dahmen, T. Stroh, *Interactive Quantum Mechanics*, Springer 2003).

Anwendung des Differentialoperators \hat{H} auf die Wellenfunktion $u(\vec{r})$ ergibt die gleiche Funktion multipliziert mit dem *Eigenwert* E .

Wie das folgende einfache Beispiel zeigt, existieren Lösungen dieses Problems i.a. nur für bestimmte Werte von E . Wir betrachten ein Teilchen, das in einem eindimensionalen Kasten der Breite a von unendlich hohen Potentialwänden eingesperrt ist. Das Potential ist somit

$$V(x) = \begin{cases} 0 & : -a/2 < x < a/2 \\ \infty & : |x| > a/2. \end{cases} \quad (2.36)$$

Im Inneren des Kastens ist die Bewegung kräftefrei, und die stationäre Schrödinger-Gleichung lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' = Eu \quad (2.37)$$

mit $u'' = d^2u/dx^2$. Im Bereich $|x| > a/2$ kann sich das Teilchen wegen der unendlich hohen potentiellen Energie nicht aufhalten, die Wellenfunktion muß somit dort verschwinden. Die Wände des Kastens definieren die *Randbedingungen*

$$u(-a/2) = u(a/2) = 0, \quad (2.38)$$

denen die Lösungen von (2.37) genügen müssen.

Die allgemeine Lösung von (2.37) lautet

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (2.39)$$

Die Integrationskonstanten A , B werden durch die Randbedingungen (2.38) festgelegt. Sie müssen das Gleichungssystem

$$Ae^{-ika/2} + Be^{ika/2} = 0$$

$$Ae^{ika/2} + Be^{-ika/2} = 0$$

erfüllen, das nur dann eine nichttriviale Lösung besitzt, wenn die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwindet. Dies führt auf die Bedingung $\sin ka = 0$. Erlaubte Werte der Wellenzahl sind $k_n = n\pi/a$ mit $n = 1, 2, 3, \dots$, und die zugehörigen *Energieeigenwerte* sind

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.40)$$

Sie bilden das *diskrete Energiespektrum* des Systems. Die Grundzustandsenergie ist $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$, was in der Größenordnung mit der Abschätzung aus der Einschlussenergie (Abschnitt 1.6) übereinstimmt.

Die Eigenfunktionen $u_n(x)$ erhalten wir durch Auswerten der allgemeinen Lösung (2.39) für $k = k_n$. Für ungerade Werte von n sind sie von der Form

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad n = 1, 3, 5, \dots, \quad (2.41)$$

für gerade n findet man

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad n = 2, 4, 6, \dots, \quad (2.42)$$

s. Abb. 2. Der Vorfaktor ist so gewählt, daß die Wellenfunktionen auf dem Intervall $[-a/2, a/2]$ normiert sind, also

$$\int_{-a/2}^{a/2} dx |u_n(x)|^2 = 1. \quad (2.43)$$

3. Der quantenmechanische Formalismus

The new theories, if one looks apart from their mathematical setting, are built up from physical concepts which cannot be explained in terms of things previously known to the student, which cannot even be explained adequately in words at all. Paul Dirac (1930)

Wir haben die Quantenmechanik bislang in ihrer wellenmechanischen Formulierung kennengelernt, die auf Erwin Schrödinger zurückgeht. Die meisten einführenden Darstellungen der Quantenmechanik benutzen die Wellenmechanik, da sie durch den Rückgriff auf intuitive Vorstellungen von klassischen Wellenphänomenen eine gewisse Anschaulichkeit suggeriert. Historisch früher als die Schrödinger'sche Theorie (1926) war die Heisenberg'sche Matrizenmechanik (1925). Aus damaliger Sicht stellten sich die beiden Ansätze sehr unterschiedlich dar, und der Nachweis ihrer Äquivalenz durch Paul Dirac war ein wichtiger Fortschritt, der seinem Urheber 1933 (gemeinsam mit Schrödinger) den Nobelpreis einbrachte.

Dirac hat als erster den abstrakten Kern der Quantenmechanik klar herausgearbeitet, den wir hier in knapper Form entwickeln. Neben der tieferen Einsicht in die ungewohnte konzeptionelle Struktur der Quantenwelt, die er vermittelt, wird sich der abstrakte Formalismus auch in späteren Anwendungen als nützlich erweisen.

3.1. Zustände

Wir erinnern zunächst an die bekannten Eigenschaften *reeller Vektorräume*, das Standardbeispiel sind Vektoren im \mathbb{R}^3 .

- (i) *Superpositionsprinzip*. Sind \vec{V}, \vec{W} Vektoren, so ist auch die Linearkombination $a\vec{V} + b\vec{W}$ ein Vektor (mit $a, b \in \mathbb{R}$).
- (ii) *Skalarprodukt*. Zwei Vektoren \vec{V}, \vec{W} wird das Skalarprodukt $\vec{V} \cdot \vec{W} \in \mathbb{R}$ zugeordnet. Für Vektoren im \mathbb{R}^3 ist

$$\vec{V} \cdot \vec{W} = \sum_{i=1}^3 V_i W_i \quad (3.1)$$

- (iii) *Norm*. Die Norm eines Vektors \vec{V} ist $|\vec{V}| = \sqrt{\vec{V} \cdot \vec{V}}$. Im \mathbb{R}^3 ist das gerade der euklidische Abstand.
- (iv) *Basis*. Eine Orthonormalbasis ist ein Satz von Vektoren \vec{e}_i mit $\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$ und der Eigenschaft, daß sich jeder Vektor \vec{V} als Linearkombination der \vec{e}_i darstellen läßt. Eine natürliche Basis im \mathbb{R}^3 sind $\vec{e}_1 = (1, 0, 0)$, $\vec{e}_2 = (0, 1, 0)$, $\vec{e}_3 = (0, 0, 1)$.

Wir zeigen jetzt (am bekannten Beispiel der Wellenmechanik), daß die Zustände eines quantenmechanischen Systems eine *komplexen* Vektorraum bilden. Dabei enthält der *Zustand* eines Systems alle Informationen, die zur vollständigen physikalischen Beschreibung nötig sind. Im Fall der Wellenmechanik ist der Zustand gegeben durch die Wellenfunktion $\psi(\vec{r}, t)$. Wir bezeichnen die Zustände in Dirac-Notation[†] mit $|\psi\rangle$ und gehen die oben angeführten Vektorraumaxiome in leicht modifizierter Form noch einmal durch.

- (i)' *Superpositionsprinzip*. Sind $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ Zustände, so ist auch die Linearkombination $\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle$ ein Zustand, wobei hier $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Dieses Prinzip ist für Lösungen $\psi(\vec{r}, t), \phi(\vec{r}, t)$ der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung offensichtlich gültig, und wurde im letzten Kapitel schon mehrfach benutzt.
- (ii)' *Skalarprodukt*. Zwei Zuständen $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ wird ein Skalarprodukt $\langle\psi|\phi\rangle \in \mathbb{C}$ zugeordnet. Es ist *hermitesch*, d.h. es gilt

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*. \quad (3.2)$$

[†] Die Dirac-Notation basiert auf der Zerlegung der spitzen Klammer ('bracket') des Skalarprodukts $\langle\psi|\phi\rangle$ in seine Bestandteile; man erhält so den 'bra'-Vektor $\langle\psi|$ und den 'ket'-Vektor $|\phi\rangle$. Die Unterscheidung zwischen den beiden Typen von Vektoren entspricht der Unterscheidung zwischen Spalten- und Zeilenvektoren im \mathbb{R}^3 . Mathematisch gesprochen sind bra-Vektoren Linearformen, die (ket)-Vektoren auf komplexe Zahlen abbilden. Die Linearformen bilden den Dualraum des Hilbertraumes.

Für Wellenfunktionen wird es realisiert durch

$$\langle \psi | \phi \rangle \equiv \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) \phi(\vec{r}, t). \quad (3.3)$$

Das Skalarprodukt $\langle \psi | \phi \rangle$ ist linear bzgl. ϕ und antilinear bzgl. ψ , d.h. es gilt für $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$

$$\langle \psi | \alpha \phi_1 + \beta \phi_2 \rangle = \alpha \langle \psi | \phi_1 \rangle + \beta \langle \psi | \phi_2 \rangle$$

$$\langle \alpha \psi_1 + \beta \psi_2 | \phi \rangle = \alpha^* \langle \psi_1 | \phi \rangle + \beta^* \langle \psi_2 | \phi \rangle$$

(iii)' *Norm.* Die Norm eines Zustands ist definiert durch $|\psi\rangle \equiv \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$. Ein normierter Zustand hat $|\psi\rangle = 1$, vgl. mit der Normierung (2.7) für Wellenfunktionen.

(iv)' *Basis.* Eine Orthonormalbasis ist ein Satz von Zuständen $|\psi_n\rangle$ mit $\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{ij}$ und der Eigenschaft, daß sich jeder Zustand $|\psi\rangle$ als Linearkombination der $|\psi_n\rangle$ darstellen läßt. Ein Beispiel für eine Orthonormalbasis sind die Eigenfunktionen $u_n(x)$ im Kastenpotential aus Abschnitt 2.5.

Zusammen definieren die Eigenschaften (i)'-(iv)' (bis auf mathematische Feinheiten) einen *Hilbertraum*. Hilberträume können endlich-dimensional oder (wie der Raum der Wellenfunktionen) unendlich-dimensional sein.

Um den physikalischen Gehalt dieses Zustandsbegriffs zu verstehen, brauchen wir noch die allgemeine Form der *Schwarz'schen Ungleichung*. Für Vektoren im \mathbb{R}^3 gilt $\vec{V} \cdot \vec{W} = |\vec{V}| |\vec{W}| \cos \theta$, wobei θ den von den beiden Vektoren eingeschlossenen Winkel bezeichnet; daraus folgt sofort $|\vec{V} \cdot \vec{W}| \leq |\vec{V}| |\vec{W}|$. Analog gilt für Hilbertraum-Vektoren[‡]

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 \leq \langle \psi | \psi \rangle \langle \phi | \phi \rangle = 1, \quad (3.4)$$

wobei im letzten Schritt die Normierung der Zustände benutzt wurde. Damit können wir das zentrale *Wahrscheinlichkeitspostulat* der Quantenmechanik formulieren, das die Wahrscheinlichkeitsinterpretation aus Abschnitt 2.2 verallgemeinert:

Die Wahrscheinlichkeit, ein in einem Zustand $|\psi\rangle$ präpariertes System bei einer Messung in einem Zustand $|\phi\rangle$ vorzufinden, ist

$$W(\psi, \phi) = |\langle \psi | \phi \rangle|^2 \quad (3.5)$$

Die Größe $W(\psi, \phi)$ ist ein Maß für die Ähnlichkeit zwischen den Zuständen $|\psi\rangle$ und $|\phi\rangle$. Durch (3.4) ist gesichert, daß diese Größe zwischen 0 und 1 liegt, und sich damit als Wahrscheinlichkeit interpretieren läßt.

Zur Illustration betrachten wir das Beispiel von Schrödinger's Katze, die sich in einem abgeschlossenen Kasten befindet und entweder lebendig oder tot ist[§]. Solange der Kasten nicht geöffnet wird, ist der Zustand der Katze eine allgemeine Superposition der Form

$$|\psi\rangle = \alpha |\text{Katze lebt}\rangle + \beta |\text{Katze ist tot}\rangle. \quad (3.6)$$

[‡] Der Beweis wird in den Übungen durchgeführt.

[§] In der aktuellen Forschung bezeichnet der Begriff der Schrödinger'schen Katze eine Superposition aus makroskopisch unterscheidbaren Zuständen.

Da die beiden Alternativen sich ausschließen, gilt $\langle \text{Katze lebt} | \text{Katze ist tot} \rangle = 0$. Wird nun der Kasten geöffnet ('Messung') finden wir die Katze entweder lebend oder tot vor, und gemäß dem Wahrscheinlichkeitspostulat treten diese Ereignisse mit den Wahrscheinlichkeiten $|\langle \psi | \text{Katze lebt} \rangle|^2 = |\alpha|^2$ bzw. $|\langle \psi | \text{Katze ist tot} \rangle|^2 = |\beta|^2$ ein (wegen der Normierung von $|\psi\rangle$ ist $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$).

3.2. Operatoren

Physikalische Observablen, also Meßgrößen wie Energie, Impuls oder Ort, werden in der Quantenmechanik durch *lineare, hermitesche Operatoren* dargestellt, die auf die Zustandsvektoren wirken. Wir erläutern diese Begriffe:

- Ein *Operator* \hat{A} bildet einen Zustandsvektor $|\psi\rangle$ auf einen anderen Zustandsvektor ab, $|\psi\rangle \rightarrow \hat{A}|\psi\rangle$.
- Der Operator ist *linear*, wenn für beliebige $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ gilt

$$\hat{A}(\alpha|\psi\rangle + \beta|\phi\rangle) = \alpha\hat{A}|\psi\rangle + \beta\hat{A}|\phi\rangle \quad (3.7)$$

- Für *hermitesche* Operatoren gilt außerdem

$$\langle \hat{A}\psi | \phi \rangle = \langle \psi | \hat{A}\phi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle, \quad (3.8)$$

wobei $\langle \hat{A}\psi |$ den dem ket-Vektor $\hat{A}|\psi\rangle$ zugeordneten bra-Vektor bezeichnet, und $|\hat{A}\phi\rangle = \hat{A}|\phi\rangle$.

Beispiele solcher Operatoren haben wir in der Wellenmechanik kennengelernt:

- Der Impulsoperator ist definiert durch $\vec{p}_{\text{op}} = -i\hbar\nabla$. Er ist offensichtlich linear, und wir zeigen, daß er auch hermitesch ist:

$$\langle \vec{p}_{\text{op}}\psi | \phi \rangle = \int d^3r (-i\hbar\nabla\psi)^*\phi = i\hbar \int d^3r (\nabla\psi^*)\phi = -i\hbar \int d^3r \psi^*(\nabla\phi) = \langle \psi | \vec{p}_{\text{op}}\phi \rangle,$$

wobei im dritten Schritt eine partielle Integration (komponentenweise) durchgeführt wurde||.

- Der Ortsoperator wirkt in der Wellenmechanik multiplikativ, $\vec{r}_{\text{op}}\psi(\vec{r}) = \vec{r}\psi(\vec{r})$, und ist damit offensichtlich hermitesch.
- Der Energie wird der in (2.35) definierte Hamilton-Operator zugeordnet. Analog zur Rechnung für den Impulsoperator überprüft man leicht, daß \hat{H} hermitesch ist.

Wir gehen noch einmal auf die Analogie zum \mathbb{R}^3 ein. Dort werden lineare Operatoren durch 3×3 -Matrizen dargestellt, und die der Hermitizitätsbedingung (3.8) entsprechende Eigenschaft ist die Symmetrie bezüglich des Skalarprodukts, also

$$(\hat{A}\vec{V}) \cdot \vec{W} = (\hat{A}\vec{W}) \cdot \vec{V}$$

|| Wir nehmen immer an, daß die Wellenfunktionen im Unendlichen verschwinden, sodaß bei der partiellen Integration keine Randterme auftreten.

für beliebige Vektoren \vec{V}, \vec{W} . Das ist genau dann erfüllt, wenn die Matrixelemente von \hat{A} symmetrisch sind, $A_{ij} = A_{ji}$.

Wir müssen uns jetzt klar machen, wie im Zusammenspiel von Operatoren und Zuständen die physikalischen Eigenschaften des Systems zustandekommen, und formulieren dazu zwei Postulate.

P1. Die *Eigenwerte* eines Operators \hat{A} sind die möglichen Meßwerte der zugehörigen Observablen.

Ein Zustand $|\psi_a\rangle$ heißt *Eigenzustand* von \hat{A} zum *Eigenwert* a , wenn $\hat{A}|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle$. Die folgende Rechnung zeigt, daß Eigenwerte von hermiteschen Operatoren reell sind:

$$\langle\psi_a|\hat{A}\psi_a\rangle = a\langle\psi_a|\psi_a\rangle = a, \quad \langle\hat{A}\psi_a|\psi_a\rangle = a^*\langle\psi_a|\psi_a\rangle = a^*,$$

und aus (3.8) folgt $a = a^*$. Das ist eine wichtige Konsistenzbedingung, denn die Eigenwerte sollen ja als physikalische Meßwerte interpretiert werden können. In den Übungen wird weiter gezeigt, daß die Eigenzustände zu verschiedenen Eigenwerten orthogonal sind.

Zur Illustration betrachten wir wieder Beispiele aus der Wellenmechanik.

(i) Die Eigenzustände des Impulsoperators sind ebene Wellen:

$$\vec{p}_{\text{op}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = -i\hbar\nabla\psi_0e^{i[\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(\vec{k})t]} = \hbar\vec{k}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \vec{p}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t).$$

(ii) Die Eigenzustände des Hamilton-Operators (2.35) sind die Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung (2.34), die Eigenwerte sind die möglichen Meßwerte der Energie.

Im Fall des eindimensionalen Kastenpotentials haben wir gesehen, daß die Energie-Eigenwerte E_n diskret sind. Man spricht in diesem Fall von einem *diskreten Spektrum* \mathbb{P} . Im Gegensatz dazu ist das Spektrum des Impulsoperators kontinuierlich.

Die physikalische Bedeutung der Eigenzustände ist einfach: Wird das System in einem Eigenzustand $|\psi_a\rangle$ des Operators \hat{A} präpariert, so ergibt die Messung der entsprechenden Observablen als Meßwert den Eigenwert a . Aber was ergibt eine solche Messung, wenn der Zustand des Systems kein Eigenzustand des betreffenden Operators ist?

Betrachten wir als Beispiel das eindimensionale Kastenpotential. Der Zustand des Systems sei eine Überlagerung der Eigenfunktionen $u_1(x)$ und $u_2(x)$, den wir in Dirac-Notation in der Form $|\psi\rangle = \alpha|u_1\rangle + \beta|u_2\rangle$ schreiben. Die Wahrscheinlichkeit, das System bei einer Messung der Energie im Zustand $|u_1\rangle$ anzutreffen, ist gemäß dem Wahrscheinlichkeitspostulat (3.5)⁺

$$W(\psi, u_1) = |\langle\psi|u_1\rangle|^2 = |\alpha|^2$$

\mathbb{P} Das Spektrum eines Operators ist die Gesamtheit seiner Eigenwerte.

⁺ Man beachte, daß $\langle u_1|u_2\rangle = 0$.

und entsprechend $W(\psi, u_2) = |\beta|^2$. Im ersten Fall ist das Ergebnis der Energiemessung E_1 , im zweiten E_2 . Das Ergebnis der Messung ist also eine *zufällige* (stochastische) Größe, und wir können (bei vollständiger Kenntnis des Systemzustands $|\psi\rangle$) nur die *Wahrscheinlichkeiten* verschiedener Meßergebnisse vorhersagen. Der allgemeine Fall einer solchen Messung wird im zweiten Postulat beschrieben:

P2. Die Messung der Observablen* \hat{A} im Zustand $|\psi\rangle$ ergibt mit Wahrscheinlichkeit $|c_n|^2$ den Eigenwert a_n , wobei die c_n die Koeffizienten in der Entwicklung[‡]

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |a_n\rangle$$

von $|\psi\rangle$ in den Eigenzuständen $|a_n\rangle$ von \hat{A} sind.

Die Normierung von $|\psi\rangle$ garantiert, daß sich die Wahrscheinlichkeiten $|c_n|^2$ zu Eins summieren. Bei wiederholten Messungen an einem im gleichen Zustand $|\psi\rangle$ präparierten System ergibt sich im Mittel der *Erwartungswert*

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n \quad (3.9)$$

von \hat{A} , der sich (wie man leicht nachrechnet) in der Form

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (3.10)$$

schreiben läßt. Die Varianz der Meßwerte ist gegeben durch

$$\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle = \langle (\hat{A}^2) \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = \sum_n |c_n|^2 a_n^2 - \left(\sum_n |c_n|^2 a_n \right)^2 \quad (3.11)$$

und die Standardabweichung

$$\Delta \hat{A} = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle} \quad (3.12)$$

verallgemeinert den in Abschnitt 2.3 eingeführten Begriff der *Unschärfe* auf allgemeine Observablen. Sofern $|\psi\rangle$ kein Eigenzustand von \hat{A} ist, gilt immer $\Delta \hat{A} > 0$.

3.3. Vertauschungsrelationen

Im Gegensatz zur gewöhnlichen Multiplikation von Zahlen kommt es bei der aufeinanderfolgenden Anwendung verschiedener Operatoren auf die Reihenfolge an, d.h. es gilt im allgemeinen[†] $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$. Dieses Verhalten ist von Drehungen im \mathbb{R}^3 schon bekannt. Wir ordnen zwei Operatoren \hat{A}, \hat{B} den *Kommutator*

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (3.13)$$

* Wir unterscheiden im folgenden nicht immer scharf zwischen einer Observablen und dem zugeordneten Operator.

‡ Die Entwicklung ist möglich, weil die $|a_n\rangle$ eine Basis des Hilbertraumes bilden.

† Bei der Anwendung des Operators $\hat{A}\hat{B}$ auf einen Zustand $|\psi\rangle$ wird zuerst \hat{B} , dann \hat{A} angewandt: $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle)$.

zu. Die Operatoren *vertauschen* (oder *kommutieren*) wenn $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, was bedeuten soll, daß die Anwendung von $[\hat{A}, \hat{B}]$ auf einen beliebigen Zustand Null ergibt.

Wir betrachten zwei Beispiele aus der Wellenmechanik:

- (i) *Impulskomponenten*. Die den Impulskomponenten p_x, p_y zugeordneten Operatoren sind $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$. Bei Anwendung auf eine Wellenfunktion $\psi(\vec{r})$ gilt

$$\hat{p}_x \hat{p}_y \psi(\vec{r}) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \psi(\vec{r}) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} \psi(\vec{r}) = \hat{p}_y \hat{p}_x \psi(\vec{r}),$$

d.h. $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0$, verschiedene Komponenten des Impulses vertauschen.

- (ii) *Ort und Impuls*. Wir untersuchen die Wirkung von $\hat{x} = x$ und $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ auf eine Funktion $\psi(x)$. Es gilt

$$\hat{x} \hat{p}_x \psi = -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x},$$

aber (Produktregel!)

$$\hat{p}_x \hat{x} \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) = -i\hbar \left(\psi + x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right),$$

und somit $[\hat{x}, \hat{p}_x] \psi = i\hbar \psi$ für jede Wellenfunktion $\psi(x)$. Wir erhalten die wichtige *Vertauschungsrelation für Ort und Impuls*,

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar, \tag{3.14}$$

die analog auch für die y - und z -Komponenten gilt. Man überzeugt sich leicht davon, daß alle anderen Kombinationen von Orts- und Impulskomponenten kommutieren.

Die Vertauschbarkeit von Operatoren ist eng verknüpft mit der Möglichkeit, die entsprechenden Observablen *gleichzeitig scharf zu messen*. Damit ist gemeint, daß es Zustände gibt, für die die Unschärfen beider Operatoren verschwinden, also

$$\Delta \hat{A} = \Delta \hat{B} = 0. \tag{3.15}$$

Das ist nur möglich, wenn \hat{A} und \hat{B} gemeinsame Eigenzustände $|\psi_{a,b}\rangle$ besitzen, mit der Eigenschaft

$$\hat{A}|\psi_{a,b}\rangle = a|\psi_{a,b}\rangle, \quad \hat{B}|\psi_{a,b}\rangle = b|\psi_{a,b}\rangle.$$

Bilden diese Zustände eine Basis $|\psi_{a,b}^n\rangle$, in der ein beliebiger Zustandsvektor $|\psi\rangle$ entwickelt werden kann, so folgt

$$[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle = [\hat{A}, \hat{B}] \sum_n c_n |\psi_{a,b}^n\rangle = \sum_n (a_n b_n - b_n a_n) |\psi_{a,b}^n\rangle = 0,$$

wobei a_n bzw. b_n die Eigenwerte von \hat{A} bzw. \hat{B} zum Eigenzustand $|\psi_{a,b}^n\rangle$ bezeichnet. Wir schließen, daß $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Tatsächlich gilt auch die Umkehrung:

Kommutierende Operatoren besitzen gemeinsame Eigenzustände und sind deshalb gleichzeitig scharf meßbar.

Anschaulich bedeutet das, daß die Messung von \hat{A} die Messung von \hat{B} nicht “stört” und umgekehrt.

Ist andererseits $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, so kann die Bedingung (3.15) nicht erfüllt werden. Es gilt stattdessen eine *verallgemeinerte Unschärferelation*

$$\Delta\hat{A} \cdot \Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|. \quad (3.16)$$

Durch Einsetzen der Vertauschungsrelation (3.14) erhalten wir insbesondere die präzise Form

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.17)$$

der Unschärferelation für Ort und Impuls, die wir bereits in Abschnitt 1.5 anschaulich begründet hatten (s. auch Abschnitt 2.3.2).

Zum Beweis von (3.16) nehmen wir an, daß $\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{B} \rangle = 0$, was sich immer durch Verschiebung des Operators um eine Konstante erreichen lässt. Dann gilt

$$(\Delta\hat{A})^2 = \langle (\hat{A})^2 \rangle = \langle \psi | \hat{A}\hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle, \quad (\Delta\hat{B})^2 = \langle (\hat{B})^2 \rangle = \langle \psi | \hat{B}\hat{B} | \psi \rangle = \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle,$$

mit $\dagger |\psi_1\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ und $|\psi_2\rangle = \hat{B}|\psi\rangle$. Aus der Schwarz’schen Ungleichung (3.4) folgt dann

$$(\Delta\hat{A})^2 (\Delta\hat{B})^2 = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle \geq |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2. \quad (3.18)$$

Nun ist

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi | \hat{A}\hat{B} | \psi \rangle = \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{B}\hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle + \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^*$$

und somit

$$\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle - \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^* = 2i\Im[\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle].$$

Da für jede komplexe Zahl z gilt, daß $|z|^2 = (\Re z)^2 + (\Im z)^2 \geq (\Im z)^2$, schließen wir

$$|\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2 \geq (\Im[\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle])^2 = -\frac{1}{4} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle^2, \quad (3.19)$$

und zusammen mit (3.18) folgt (3.16).

4. Eindimensionale Potentialprobleme

In diesem Kapitel behandeln wir die eindimensionale stationäre Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x). \quad (4.1)$$

4.1. Potentialstufe

Wir betrachten zunächst Gleichung (4.1) mit Potential (siehe Abb. 3)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}. \quad (4.2)$$

\dagger Man beachte, daß die Zustände $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ nicht normiert sind!

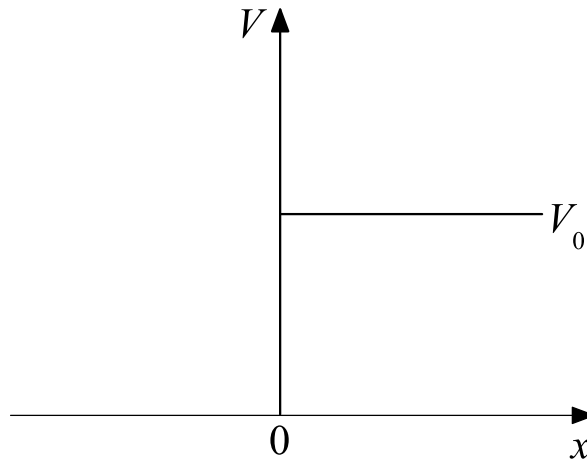


Abbildung 3. Darstellung des Potentials $V(x)$ aus Gleichung (4.2).

Wir suchen Lösungen zu fester Energie $E < V_0$, $E > 0$. Somit ergibt sich für $x \leq 0$ folgende Gleichung:

$$u'' = - \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}}_{>0} u = -k^2 u, \quad (4.3)$$

mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar}$, wobei p gleich dem klassischen Impuls ist. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist gegeben durch die Superposition einer rechtslaufenden und einer linkslaufenden ebenen Welle:

$$u(x) = A \underbrace{e^{ikx}}_{\text{rechtslaufend}} + B \underbrace{e^{-ikx}}_{\text{linkslaufend}}. \quad (4.4)$$

Ganz analog erhält man für $x > 0$ die Gleichung

$$u'' = \underbrace{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}_{>0} u = -\kappa^2 u, \quad (4.5)$$

mit $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$. In diesem Bereich ist die allgemeine Lösung gegeben durch

$$u(x) = a^{\kappa x} + b e^{-\kappa x}. \quad (4.6)$$

Damit die Wellenfunktion für $x \rightarrow \infty$ nicht divergiert, muß $a = 0$ sein.

Wir betrachten nun die Randbedingungen bei $x = 0$. Da u und V endlich sind, ist auch u'' endlich. Daraus folgt, dass sowohl u' als auch u stetig sein müssen. Hieraus ergeben sich folgende Bedingungen:

$$\begin{aligned} A + B &= b && \text{Stetigkeit von } u, \\ ik(A - B) &= -\kappa b && \text{Stetigkeit von } u'. \end{aligned}$$

Dies sind zwei Gleichungen für drei Unbekannte, von denen aber eine durch die Normierung der Wellenfunktion eliminiert wird. Für die Koeffizienten erhält man

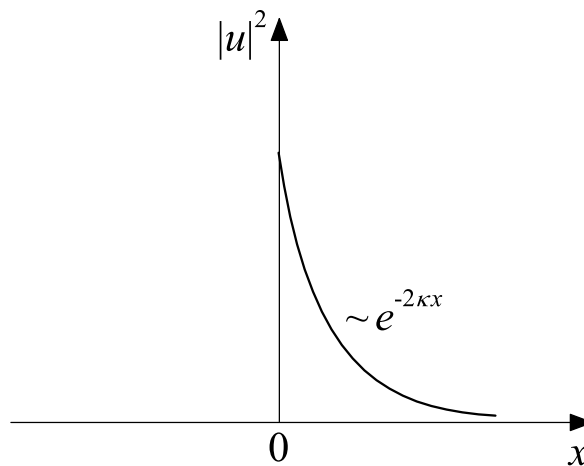


Abbildung 4. Schematische Darstellung des Abfalls der Wellenfunktion im klassisch verbotenen Bereich $x > 0$.

folgende Lösungen

$$\frac{B}{A} = \frac{1 - i\frac{\kappa}{k}}{1 + i\frac{\kappa}{k}},$$

$$\frac{b}{A} = \frac{2}{1 + i\frac{\kappa}{k}}.$$

Dieses Ergebnis lässt sich wie folgt interpretieren:

- (i) $x > 0$: $u(x) \sim e^{-\kappa x} \Rightarrow$ die Wellenfunktion dringt in den klassisch verbotenen Bereich ein (siehe Abb. 4). Die Eindringtiefe ist

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}.$$

Insbesondere sieht man, dass die Eindringtiefe mit größerer Energiedifferenz $V_0 - E$ abnimmt und im klassischen Limes, $\hbar \rightarrow 0$, gegen Null geht.

- (ii) $x \leq 0$:

$$u(x) = \underbrace{Ae^{ikx}}_{\text{einlaufende Welle}} + \underbrace{Be^{-ikx}}_{\text{reflektierte Welle}}$$

Für den hier betrachteten Fall findet man $|A| = |B|$. Dies bedeutet, dass alle Teilchen, welche von links gegen den die Stufe laufen, letztlich reflektiert werden. Im allgemeinen lässt sich der Anteil der reflektierten Teilchen mit dem *Reflektionskoeffizienten* $R = \frac{|B|^2}{|A|^2}$ erfassen. In unserem Fall gilt

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1.$$

Dementsprechend ist der Anteil der Teilchen, welche die Stufe durchdringen

$$T = 1 - R = 0,$$

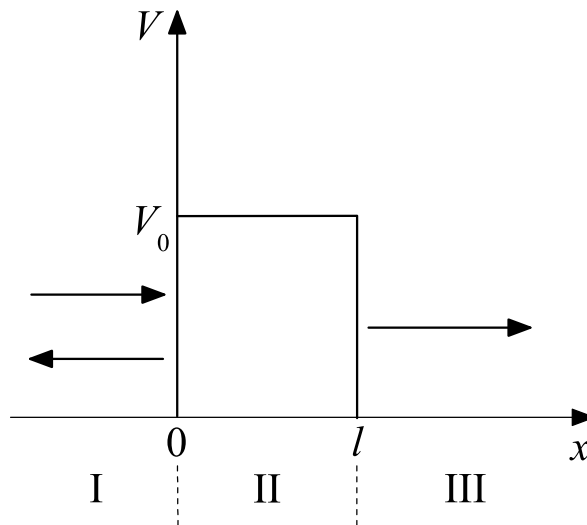


Abbildung 5. Darstellung des Potentials $V(x)$ aus Gleichung (4.7).

wobei $T = 1 - R$ den *Transmissionskoeffizienten* definiert. Klassisch wäre

$$R = \begin{cases} 1, & E < V_0 \\ 0, & E > V_0 \end{cases} .$$

Das bedeutet, dass im klassischen Fall für $E < V_0$ alle Teilchen reflektiert werden, während für $E > V_0$ alle Teilchen durch die Stufe durchlaufen. Quantenmechanisch ist hingegen auch für $E > V_0$ der Reflektionskoeffizient positiv, $R > 0$, d.h. auch in diesem Fall wird ein Anteil der Teilchen an der Stufe reflektiert; dies wird in den Übungen gezeigt.

4.2. Tunneleffekt

4.2.1. Rechteckbarriere. In diesem Abschnitt betrachten wir eine Potentialbarriere, welche durch das Potential

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 \leq x \leq l \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.7)$$

definiert ist (siehe Abb. 5). Teilchen laufen von links mit der Energie $E < V_0$ ein. Analog zum letzten Abschnitt kann die stationäre Schrödinger-Gleichung zunächst für die einzelnen Teilbereiche gelöst werden.

(I) $x < 0$: Die Lösung in diesem Bereich besteht wieder aus der Superposition einer einlaufenden und einer reflektierten ebenen Welle

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$

mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$.

(II) $0 \leq x \leq l$: Die stationäre Schrödinger-Gleichung in diesem Bereich ergibt sich zu

$$u'' = \kappa^2 u,$$

mit $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$. Die allgemeine Lösung dieser Gleichung lautet

$$u(x) = ae^{\kappa x} + be^{-\kappa x}.$$

In diesem Fall müssen wir beide Terme berücksichtigen. Wenn man so will, kann die nach rechts exponentiell ansteigende Komponente als der an der rechten Seite der Potentialbarriere reflektierte Anteil interpretiert werden.

(III) $x > l$: In diesem Bereich besteht die Lösung aus einer auslaufenden ebenen Welle

$$u(x) = Ce^{ikx}.$$

Insgesamt müssen 5 unbekannte Koeffizienten bestimmt werden. Dies geschieht, analog zum letzten Abschnitt, durch Ausnutzung der folgenden Randbedingungen:

Stetigkeit von u , u' bei $x = 0$,

Stetigkeit von u , u' bei $x = l$,

Normierung.

Das sind 5 Bedingungen für 5 Unbekannte, und man findet, dass für jede Energie E eine Lösung existiert. Als Ergebnis der Rechnung erhält man für den Transmissionskoeffizienten den Ausdruck

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \frac{V_0^2}{E(V_0 - E)} \sinh^2(\kappa l)}.$$

Wir betrachten einige wichtige Grenzfälle:

(i) $\kappa l \gg 1$: Dies ist der Fall einer sehr hohen, bzw. langen, Potentialbarriere. Hier gilt

$$\sinh(\kappa l) \simeq \frac{1}{2} e^{\kappa l} \rightarrow \infty \Rightarrow T \simeq \frac{4E(V_0 - E)}{V_0} e^{-2\kappa l}. \quad (4.8)$$

Der Exponentialfaktor entspricht gerade dem Eindringen der Wellenfunktion in die Barriere.

(ii) $l \rightarrow 0$: In diesem Fall gilt $T \rightarrow 1$. Dies bedeutet, dass im Grenzfall einer verschwindenden Barriere alle Teilchen diese durchqueren können.

(iii) $E \rightarrow V_0$: Hier gilt $\kappa l \rightarrow 0$ und somit $\sinh^2(\kappa l) \simeq (\kappa l)^2$

$$\Rightarrow T \rightarrow \frac{1}{1 + \frac{1}{2} V_0 \frac{ml^2}{\hbar^2}} < 1.$$

Wir sehen, dass bei quantenmechanischer Behandlung des Problems in diesem Fall, in dem klassische Teilchen die Barriere immer passieren würden, ein nicht verschwindender Anteil der Teilchen weiterhin an der Barriere reflektiert wird.

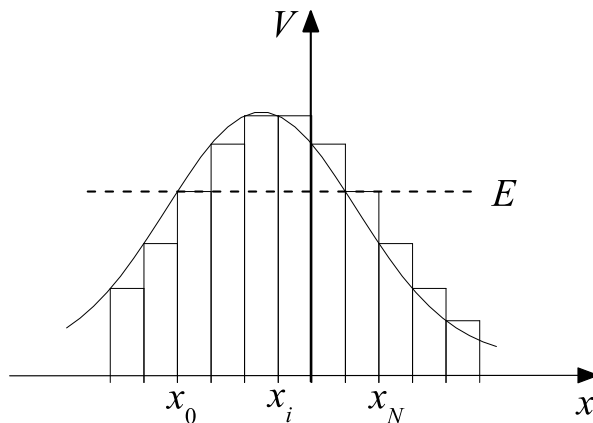


Abbildung 6. Darstellung einer allgemeinen Potentialbarriere $V(x)$ und ihrer Diskretisierung.

4.2.2. Allgemeine Potentialbarriere. Um dieses Problem anzugehen diskretisieren wir zunächst die Barriere in N Teilintervalle (x_i, x_{i+1}) der Länge $\Delta l = \frac{x_N - x_0}{N}$ (siehe Abb. 6). Das Potential im Intervall (x_i, x_{i+1}) nähern wir durch $V_i = V(x_i)$. Im Prinzip müssten wir für diesen Ansatz N Koeffizienten über $N - 1$ Randbedingungen zuzüglich Normierung erfüllen. Wir betrachten aber im folgenden eine Näherung, welche für den Grenzfalle geringer Transmission durch jede einzelne Stufe gilt (entsprechend dem Fall (i) aus Abschnitt 4.2.1). In diesem Fall ist der Transmissionskoeffizient für eine einzelne Stufe gegeben durch

$$T_i \sim e^{-2\kappa_i \Delta l},$$

mit $\kappa_i = \frac{\sqrt{2m(V_i - E)}}{\hbar}$ (s. Gleichung (4.8)). Da wir aufgrund der starken Dämpfung innerhalb einer Stufe Mehrfach-Reflexionen vernachlässigen können, ist die Transmission durch die gesamte Barriere gegeben durch das Produkt der Transmissionskoeffizienten durch die einzelnen Barrieren:

$$T = \prod_{i=1}^N T_i \sim \prod_{i=1}^N e^{-2\kappa_i \Delta l} = e^{-2 \sum_{i=1}^N \kappa_i \Delta l} \longrightarrow e^{-2 \int_{x_0}^{x_N} dx \kappa(x)} = e^{-2i \frac{S}{\hbar}} \text{ für } N \rightarrow \infty, \Delta l \rightarrow 0,$$

wobei $S = \int_{x_0}^{x_N} dx \sqrt{2m(E - V(x))} = \int_{x_0}^{x_N} dx p(x)$ die klassische Wirkung ist. Diese Näherungslösung kann mit Hilfe des Wenzel-Kramers-Brillouin (WKB) Ansatzes besser begründet werden und gilt im klassischen Grenzfalle $\hbar \ll S$.

4.2.3. Anwendung: Rastertunnelmikroskop. Beim Rastertunnelmikroskop[†] tunneln Elektronen zwischen einer scharfen Metallspitze und einer leitenden Oberfläche (siehe Abb. 7). Der Tunnelstrom I_t ist proportional zum Transmissionskoeffizienten,

$$I_t \sim T \sim e^{-2\kappa l}, \quad (4.9)$$

[†] 1986 erhielten G. Binning und H. Rohrer den Nobelpreis für die Erfindung des Rastertunnelmikroskops.

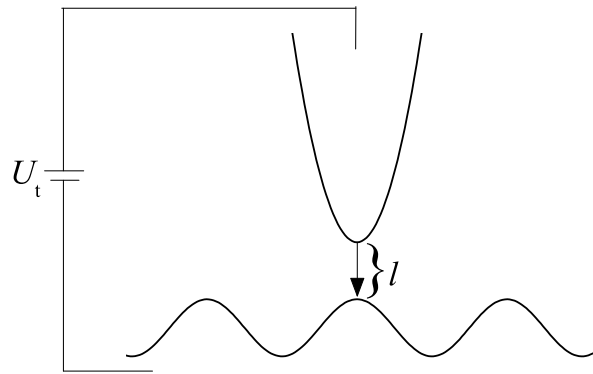


Abbildung 7. Schematische Darstellung des Aufbaus eines Rastertunnelmikroskops.

wobei $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$ und V_0 die Dissoziationsenergie eines Elektrons aus der Spitze, bzw. der Probe, ist. Setzt man die korrekten Werte für \hbar und die Elektronenmasse m ein sowie eine typische Energiedifferenz $V_0 - E = 1\text{eV}$, erhält man für die Eindringtiefe

$$\frac{1}{\kappa} \simeq 2\text{\AA}.$$

Der Tunnelstrom (4.9) hängt somit extrem empfindlich vom Abstand ab, was den Schlüssel zur sub-atomaren Auflösung des Tunnelmikroskops liefert. Im Tunnelbetrieb wird die Oberfläche "abgerastert", wobei durch Einstellung der Tunnelspannung U_t der Tunnelstrom I_t konstant gehalten wird. Aus den Werten der Tunnelspannung erhält man so ein Bild der Topographie.

4.3. Kastenpotential endlicher Tiefe

In den bisher behandelten Beispielen dieses Kapitels fanden sich stets Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung zu beliebigen Werten der Energie $E > 0$. Demgegenüber kann die Energie im Kastenpotential (2.36) nur diskrete Werte E_n annehmen. Wir verallgemeinern jetzt (2.36) und betrachten ein Kastenpotential endlicher Tiefe $V_0 > 0$, definiert durch

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| > a/2 \\ 0, & |x| \leq a/2, \end{cases} \quad (4.10)$$

das im Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$ in (2.36) übergeht.

Wir suchen zunächst Lösungen mit Energien $0 < E < V_0$. Wie bei der Rechteckbarrier (4.7) ist die x -Achse in drei Bereiche zu unterteilen (s. Abb.5).

- (I) $x < -a/2$: Hier ist $E < V(x)$ und die allgemeine Lösung ist eine Linearkombination von Exponentialfunktionen mit reellem Argument,

$$u(x) = a_+ e^{\kappa x} + a_- e^{-\kappa x}.$$

mit $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}$. Damit die Wellenfunktion normierbar ist, muß der für $x \rightarrow -\infty$ anwachsende Term verschwinden, also $a_- = 0$. Es bleibt ein freier Parameter a_+ .

(II) $-a/2 \leq x \leq a/2$: Hier ist $E > V(x)$ und die allgemeine Lösung ist oszillatorisch,

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

mit $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Beide Parameter A, B sind frei wählbar.

(III) $x > a/2$: Hier hat man, wie in Bereich (I), eine Lösung der Form

$$u(x) = b_+ e^{\kappa x} + b_- e^{-\kappa x},$$

und wegen der Normierbarkeit muß b_+ verschwinden.

Es bleiben insgesamt 4 freie Parameter (a_+, A, B, b_-), mit denen vier Randbedingungen (Stetigkeit von u und u' bei $x = \pm a/2$) sowie die Normierung der Wellenfunktion gewährleistet werden muß. Im allgemeinen wird man diese 5 Bedingungen nicht erfüllen können, es sei denn, die Energie E nimmt bestimmte Werte an.

Nach einigen Umformungen läßt sich das lineare Gleichungssystem für die vier Koeffizienten auf zwei Gleichungen für die dimensionslosen Parameter $X = 2ka$ und $Y = 2\kappa a$ reduzieren. Sie lauten

$$Y = X \tan X, \quad X^2 + Y^2 = \rho^2 = \frac{8ma^2V_0}{\hbar^2}. \quad (4.11)$$

Die graphische Analyse zeigt, daß für kleine ρ stets eine Lösung im Quadranten $X > 0, Y > 0$ existiert, entsprechend einem *gebundenen Zustand* des Potentials. Macht man den Potentialtopf tiefer (Erhöhung von V_0) oder breiter (Erhöhung von a) entstehen weitere Lösungen[‡] (s. Abb.8).

Die Analyse für $E > V_0$ verläuft analog, mit dem Unterschied, daß in diesem Fall die Lösung in den Bereichen (I) und (III) ebenfalls oszillatorisch ist. Man hat deshalb im Bereich (I) zwei freie Koeffizienten (die Amplituden der einlaufenden und der reflektierten Welle) und damit insgesamt 5 verfügbare Parameter. Wie bei der Rechteckbarriere in Abschnitt 4.2.1 existiert zu jeder Energie $E > V_0$ eine Lösung.

Das Spektrum des Hamilton-Operators mit dem Potential (4.10) umfaßt somit einen *diskreten* Bereich $0 < E < V_0$ mit endlich vielen isolierten Eigenwerten, und einen *kontinuierlichen* Bereich $E > V_0$. Die Eigenzustände im diskreten Teil des Spektrums sind *gebunden*, während der kontinuierliche Teil des Spektrums delokalisierte *Streuzustände* beschreibt. Wie in der klassischen Mechanik ist die Bewegung des Teilchens für $E < V_0$ im Potentialbereich lokalisiert und für $E > V_0$ ungebunden. Neu ist die Tatsache, daß die gebundene Bewegung nur bei einem endlichen, diskreten Satz von Energien möglich ist, und daß ein gestreutes Teilchen an dem Potential reflektiert werden kann, obwohl seine Energie größer ist als V_0 (was wir hier nicht explizit zeigen).

4.4. Der harmonische Oszillator

Als letztes Beispiel betrachten wir den quantenmechanischen harmonischen Oszillator. Das Potential ist $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, wobei ω die klassische Schwingungsfrequenz

[‡] Neue Lösungen entstehen immer dann, wenn ρ ein ganzzahliges Vielfaches von π erreicht.

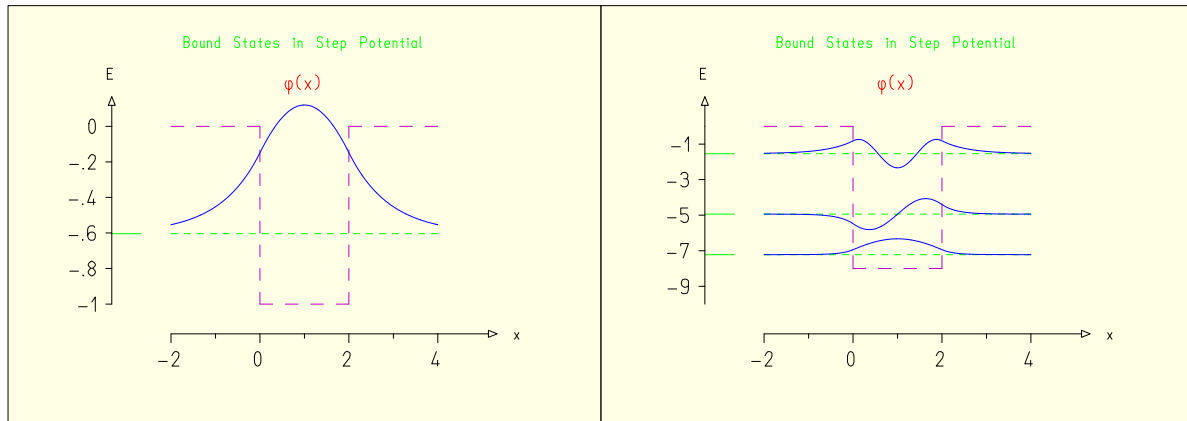


Abbildung 8. Eigenfunktionen im eindimensionalen Kastenpotential endlicher Tiefe. Das linke Bild zeigt den einzigen gebundenen Zustand in einem flachen Potentialtopf ($\rho < \pi$), das rechte drei Eigenfunktionen $u_n(x)$, $n = 1, 2, 3$, in einem tieferen Potentialtopf ($\rho > 2\pi$). Wie in Abb.2 hat die Eigenfunktion $u_n(x)$ $n - 1$ Nullstellen ('Knoten'). Die vertikale Anordnung der Grundlinien der Graphen von $u_n(x)$ folgt den Energieeigenwerten E_n . Die Bilder wurden erzeugt mit dem Programm INTERQUANTA (S. Brandt, H.D. Dahmen, T. Stroth, *Interactive Quantum Mechanics*, Springer 2003).

bezeichnet, und die stationäre Schrödinger-Gleichung lautet

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 u = E u. \quad (4.12)$$

Das Potential ist unbeschränkt, und wir erwarten ein rein diskretes Energiespektrum.

Es ist nützlich, zunächst dimensionslose Variable einzuführen. Eine Abschätzung mit Hilfe der Einschlußenergie^{||} zeigt, daß die Grundzustandsenergie von der Größenordnung $\hbar\omega$ ist. Wir messen deshalb Energien in Einheiten von $\hbar\omega$ und schreiben

$$E = \frac{1}{2} \hbar \omega \varepsilon$$

mit der dimensionslosen Energie ε . Die charakteristische Breite b der Grundzustands-Wellenfunktion kann ebenfalls aus dem Begriff der Einschlußenergie abgeleitet werden. Gemäß (1.17) ist $E_{\text{Einschluss}} \sim \frac{\hbar^2}{mb^2}$. Setzt man dies gleich $\hbar\omega$, so folgt die *Oszillatorlänge*

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}.$$

Wir teilen (4.12) auf beiden Seiten durch $\hbar\omega/2$ und führen die dimensionslose Koordinate $\xi = x/b$ ein. Damit vereinfacht sich (4.12) zu

$$-\frac{d^2 u}{d\xi^2} + \xi^2 u = \varepsilon u, \quad (4.13)$$

§ D.h. es gibt keine endlichen Werte V_{\min}, V_{\max} , sodaß $V_{\min} < V(x) < V_{\max}$ für alle x .

|| S. Übungsaufgabe 1.

und wir fragen, für welche Werte von ε diese Differentialgleichung *normierbare* Lösungen $u(\xi)$ besitzt.

Den schnellsten Weg zur Lösung bietet die s.g. Operatormethode, die wesentlich auf den abstrakten Konzepten aus Kapitel 3 aufbaut. Wir wollen die Eigenwerte und Eigenzustände des Hamilton-Operators

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (4.14)$$

bestimmen. Dazu ziehen wir gewissermaßen die ‘Wurzel’ aus \hat{H} , d.h. wir stellen \hat{H} als Produkt von zwei Operatoren dar, die linear in \hat{p} und \hat{x} sind. Diese Operatoren sind

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{b}\hat{x} + \frac{i}{\hbar}b\hat{p} \right], \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{b}\hat{x} - \frac{i}{\hbar}b\hat{p} \right]. \quad (4.15)$$

Sie sind dimensionslos, nicht-hermitesch, und zueinander adjungiert^ℙ. Damit folgt

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{b^2}\hat{x}^2 + \frac{i}{\hbar}(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) + \frac{b^2}{\hbar^2}\hat{p}^2 \right] = \frac{1}{\hbar\omega} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \right] - \frac{1}{2},$$

wobei im zweiten Schritt die Vertauschungsrelation (3.14) zwischen Ort und Impuls ausgenutzt wurde. Wir erhalten so die gewünschte Darstellung von \hat{H} in der Form

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (4.16)$$

Analog zeigt man, daß $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2}$, und deshalb

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1. \quad (4.17)$$

Tatsächlich reichen die Beziehungen (4.16) und (4.17) aus, um das Spektrum von \hat{H} zu bestimmen. Die Eigenwerte und Eigenzustände des Operators $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ bezeichnen wir mit λ bzw. $|\lambda\rangle$, die Eigenwerte von \hat{H} sind dann $\hbar\omega(\lambda + \frac{1}{2})$. Wir beweisen die folgenden Eigenschaften der $|\lambda\rangle$:

- (i) $\lambda \geq 0$. Dies folgt aus der Tatsache, daß \hat{a} und \hat{a}^\dagger zueinander konjugiert sind. Für einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$ gilt

$$\langle\psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\psi\rangle = \langle\phi|\phi\rangle \geq 0$$

mit $|\phi\rangle = \hat{a}|\psi\rangle$, also insbesondere für $|\psi\rangle = |\lambda\rangle$

$$0 \leq \langle\lambda|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda.$$

ℙ Jedem Operator \hat{A} kann ein adjungierter Operator \hat{A}^\dagger zugeordnet werden, sodaß für beliebige Zustände $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ gilt

$$\langle\psi|\hat{A}\phi\rangle = \langle\hat{A}^\dagger\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}^\dagger\psi\rangle^*.$$

Hermitesche Operatoren sind selbstadjungiert, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

- (ii) $\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle$ ist ein Eigenzustand von $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ zum Eigenwert $\lambda + 1$. Zum Beweis müssen wir zeigen, daß die Anwendung von $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ auf $\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle$ den gleichen Zustand ergibt, multipliziert mit $\lambda + 1$. Unter Benutzung der Vertauschungsrelation (4.17) folgt in der Tat

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}(\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle) = \hat{a}^\dagger(\hat{a}\hat{a}^\dagger)|\lambda\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1)|\lambda\rangle = (\lambda + 1)\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle.$$

\hat{a}^\dagger heißt deshalb auch *Aufsteigeoperator*.

- (iii) $\hat{a}|\lambda\rangle$ ist ein Eigenzustand von $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ zum Eigenwert $\lambda - 1$. Der Beweis verläuft analog zu (ii):

$$(\hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}|\lambda\rangle = (\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1)\hat{a}|\lambda\rangle = \hat{a}(\hat{a}^\dagger\hat{a} - 1)|\lambda\rangle = (\lambda - 1)\hat{a}|\lambda\rangle.$$

\hat{a} heißt entsprechend *Absteigeoperator*, die beiden Operatoren \hat{a}, \hat{a}^\dagger zusammen *Leiteroperatoren*.

- (iv) Es muß einen Zustand $|0\rangle$ geben mit der Eigenschaft, daß $\hat{a}|0\rangle = 0$. Dieser Zustand ist ein Eigenzustand von $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ mit Eigenwert 0. Wir führen einen Widerspruchsbeweis und nehmen an, die Aussage sei falsch. Dann muß es einen kleinsten positiven Eigenwert $\lambda_{\min} \in (0, 1)$ geben. Anwendung von \hat{a} auf den zugehörigen Eigenzustand $|\lambda_{\min}\rangle$ ergibt einen Eigenzustand mit Eigenwert $\lambda_{\min} - 1 < 0$, im Widerspruch zu (i).

Damit liegt das Spektrum von $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ fest: Die Eigenwerte λ sind die nicht-negativen ganzen Zahlen $\lambda = 0, 1, 2, \dots$ und das Energiespektrum des eindimensionalen harmonischen Oszillators ist

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.18)$$

Die Eigenwerte sind *äquidistant* und der Grundzustand hat die *Nullpunktsenergie* $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

Die zugehörigen Eigenfunktionen lassen sich ebenfalls mit der Operatormethode bequem berechnen⁺. Zunächst wird die Grundzustands-Wellenfunktion $u^{(0)}(\xi)$ aus der Bedingung $\hat{a}|0\rangle = 0$ bestimmt, die in Ortsdarstellung die Form

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} + \xi \right) u^{(0)}(\xi) = 0$$

annimmt. Die weiteren Eigenfunktionen werden dann durch mehrfache Anwendung des Aufsteigeoperators

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right)$$

erzeugt. Im Ergebnis findet man für die Eigenfunktionen die Form

$$u^{(n)}(\xi) = A_n H_n(\xi) e^{-c\xi^2},$$

⁺ Dies ist Gegenstand einer Übungsaufgabe.

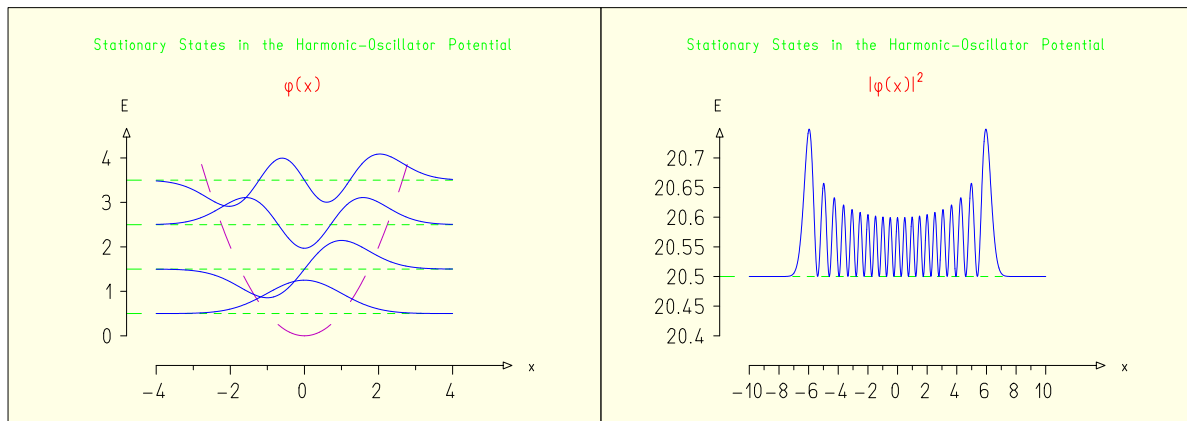


Abbildung 9. Eigenfunktionen des eindimensionalen harmonischen Oszillators. Das linke Bild zeigt die Eigenfunktionen $u^{(n)}$ für $n = 0, 1, 2, 3$, das rechte die Wahrscheinlichkeitsdichte $|u^{(n)}|^2$ für $n = 20$. Für große n nähert sich die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des klassischen Teilchen an. Das rechte Bild zeigt eine Überhöhung der Wahrscheinlichkeitsdichte am Rand, die der Verlangsamung der klassischen Bewegung an den Umkehrpunkten der harmonischen Schwingung entspricht. Wie in Abb.2 und 8 hat die Eigenfunktion $u^{(n)}(x)$ n Nullstellen ('Knoten'). Die Bilder wurden erzeugt mit dem Programm INTERQUANTA (S. Brandt, H.D. Dahmen, T. Stroh, *Interactive Quantum Mechanics*, Springer 2003).

wobei A_n und c Konstanten sind und $H_n(\xi)$ ein Hermite-Polynom vom Grade n . Einige der $u^{(n)}$ sind in Abb.9 dargestellt.

Das äquidistante Spektrum (4.18) erlaubt die Einführung des Begriffs der *Schwingungsquanten*: Wir sagen, daß der Zustand der Energie $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ besetzt ist mit n Quanten der Energie $\hbar\omega$. Diese Struktur tritt bei allen harmonischen Schwingungsvorgängen in der Physik auf.

Ein wichtiges Beispiel ist das elektromagnetische Feld, dessen Schwingungsquanten die (bereits aus Kapitel 1 bekannten) Photonen sind. In der Quantentheorie des elektromagnetischen Feldes* werden Photonen als Teilchen behandelt, und die oben eingeführten Aufsteige- und Absteigeoperatoren werden zu *Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren* für Photonen, deren Wirkung schematisch durch

$$\hat{a}^\dagger |n \text{ Photonen} \rangle \sim |n + 1 \text{ Photonen} \rangle, \quad \hat{a} |n \text{ Photonen} \rangle \sim |n - 1 \text{ Photonen} \rangle$$

dargestellt werden kann. Der Grundzustand $|0\rangle$ beschreibt das Vakuum des elektromagnetischen Feldes, und der Operator $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ zählt die Zahl der Photonen in einem Zustand.

Weitere Beispiele für Schwingungsquanten treten in der Festkörperphysik auf, z.B. die Quanten der Gitterschwingungen (*Phononen*) und der Magnetisierungswellen in

* Diese Theorie bildet die Grundlage der *Quantenoptik*, die sich u.a. mit der Funktionsweise von Lasern befasst. Sie ist ein einfaches Beispiel einer Quantenfeldtheorie. Der Übergang zur Beschreibung durch Schwingungsquanten und Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren wird auch *zweite Quantisierung* genannt.

magnetischen Materialien (*Magnonen*). Diese (und andere) harmonische Anregungen werden als *Quasiteilchen* bezeichnet.

4.5. Zusammenfassung

Wir fassen die verschiedenen Lösungstypen der eindimensionalen stationären Schrödinger-Gleichung (4.1) zusammen, die uns in diesem Kapitel begegnet sind.

- (i) *Streuzustände*. Es gibt eine räumlich beschränkte Potentialregion (x_-, x_+) , in der sich z.B. eine Potentialstufe (Gl. (4.2)), eine Barriere (Gl. (4.7)) oder ein Potentialtopf (Gl.(4.10)) befindet. Außerhalb der Potentialregion ist das Potential konstant, und nimmt die Werte V_- (bei $x < x_-$) bzw. V_+ (bei $x > x_+$) an. Wir betrachten Energien $E > \max[V_-, V_+]$. Lösungen existieren für jede Energie in diesem Bereich, das Spektrum ist kontinuierlich. Im Intervall $x < x_-$ ist die Lösung eine Superposition einer einlaufenden und einer reflektierten ebenen Welle, im Bereich $x > x_+$ eine transmittierte ebene Welle. Aus den Koeffizienten der ebenen Wellen erhält man die Transmissions- und Reflektionskoeffizienten T und R , und die Wahrscheinlichkeitserhaltung impliziert $T + R = 1$.
- (ii) *Gebundene Zustände*. Es ist nützlich, hier zwei Situationen zu unterscheiden.
- a.) *Unbeschränkte Potentiale*. Beispiele sind das Kastenpotential mit unendlich hohen Wänden (Gl.(2.36)) und der harmonische Oszillator. Das Spektrum ist rein diskret, es gibt unendlich viele räumlich lokalisierte Eigenzustände. Die beiden Beispiele unterscheiden sich in der Abhängigkeit der Energie von der Quantenzahl des Zustands ($E_n \sim n^2$ im Kastenpotential, $E_n \sim n$ beim harmonischen Oszillator).
- b.) *Beschränkte Potentiale*. In diesem Fall gibt es eine endliche Zahl von gebundenen Zuständen im Energiebereich $V_{\min} < E < V_{\max}$ und ein kontinuierliches Spektrum mit Streuzuständen für $E > V_{\max}$. Dies wurde beispielhaft demonstriert am Kastenpotential (4.10).

5. Struktur der Atome

Alle ganzzahligen Gesetze der Spektrallinien und der Atomistik fließen letzten Endes aus der Quantentheorie. Sie ist das geheimnisvolle Organon, auf dem die Natur die Spektralmusik spielt und nach dessen Rhythmus sie den Bau der Atome und der Kerne regelt.

Arnold Sommerfeld (1919)

In diesem Kapitel untersuchen wir die quantenmechanische Bewegung eines Elektrons im Coulomb-Potential des Atomkerns. Der Hamilton-Operator ist

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}_{\text{op}}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}|} \quad (5.1)$$

mit der Kernladungszahl Z und der reduzierten Elektronenmasse μ . Wie beim Kepler-Problem der klassischen Mechanik nutzen wir die Erhaltung des Drehimpulses, die aus der Rotationssymmetrie des Potentials folgt. Zunächst müssen wir uns deshalb mit der Quantenmechanik des Drehimpulses befassen.

5.1. Quantenmechanik des Drehimpulses

Der Drehimpulsoperator ist definiert durch

$$\vec{L}_{\text{op}} = \vec{r}_{\text{op}} \times \vec{p}_{\text{op}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z),$$

also unter Benutzung von (2.4)

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \hat{L}_y = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Daraus folgen die Vertauschungsrelationen

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z, \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y, \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x. \quad (5.2)$$

Als Maß für den Gesamtbetrag des Drehimpulses betrachten wir außerdem den Operator

$$\vec{L}_{\text{op}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2.$$

In den Übungen wird gezeigt, daß dieser Operator mit den einzelnen Komponenten des Drehimpulses vertauscht, also

$$[\vec{L}_{\text{op}}^2, \hat{L}_x] = [\vec{L}_{\text{op}}^2, \hat{L}_y] = [\vec{L}_{\text{op}}^2, \hat{L}_z] = 0. \quad (5.3)$$

Aus den allgemeinen Überlegungen von Abschnitt 3.3 können wir somit schließen, daß

- verschiedene Komponenten des Drehimpulses nicht gleichzeitig scharf meßbar sind, aber
- \vec{L}_{op}^2 gemeinsam mit \hat{L}_z (oder einer anderen Komponente) gleichzeitig scharf meßbar ist.

Wir suchen im folgenden gemeinsame Eigenzustände von \vec{L}_{op}^2 und \hat{L}_z . Da der Drehimpuls die Dimension einer Wirkung hat, bezeichnen wir die Eigenwerte mit $\hbar^2 \lambda$ bzw. $\hbar m$, mit dimensionslosen Zahlen λ und m . Die zugehörigen Eigenzustände sind in Dirac-Notation $|\lambda, m\rangle$, also

$$\vec{L}_{\text{op}}^2 |\lambda, m\rangle = \hbar^2 \lambda |\lambda, m\rangle, \quad \hat{L}_z |\lambda, m\rangle = \hbar m |\lambda, m\rangle.$$

5.1.1. Eigenwerte. Zur Bestimmung der Eigenwerte benutzen wir eine Operatorenmethode, die sich eng an das Vorgehen beim eindimensionalen harmonischen Oszillator in Abschnitt 4.4 anlehnt.

(i) Wir leiten zunächst eine Ungleichung zwischen λ und m her. Offensichtlich gilt

$$\langle \lambda, m | \vec{L}_{\text{op}}^2 - \hat{L}_z^2 | \lambda, m \rangle = \hbar^2 (\lambda - m^2) = \langle \lambda, m | \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 | \lambda, m \rangle \geq 0$$

und deshalb

$$\lambda \geq m^2 \geq 0. \quad (5.4)$$

(ii) Als nächstes definieren wir die Leiteroperatoren

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y,$$

die den Operatoren \hat{a}, \hat{a}^\dagger aus Abschnitt 4.4 entsprechen und den Vertauschungsrelationen

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_z] = -\hbar L_+, \quad [\hat{L}_-, \hat{L}_z] = \hbar L_-, \quad [\hat{L}_+, \vec{L}_{\text{op}}^2] = [\hat{L}_-, \vec{L}_{\text{op}}^2] = 0 \quad (5.5)$$

genügen. Aus (5.5) folgert man, daß der Zustand $\hat{L}_+|\lambda, m\rangle$ ein gemeinsamer Eigenzustand von \vec{L}_{op}^2 und \hat{L}_z mit Eigenwerten $\hbar^2\lambda$ und $\hbar(m+1)$ ist, d.h. es gibt Koeffizienten $c_+(\lambda, m)$ sodaß

$$\hat{L}_+|\lambda, m\rangle = c_+(\lambda, m)|\lambda, m+1\rangle. \quad (5.6)$$

Der Operator \hat{L}_+ heißt deshalb *Aufsteigeoperator*. Entsprechend gilt

$$\hat{L}_-|\lambda, m\rangle = c_-|\lambda, m-1\rangle, \quad (5.7)$$

und \hat{L}_- heißt *Absteigeoperator*.

Durch Anwendung von \hat{L}_+ und \hat{L}_- erzeugt man so eine ganze *Leiter* von Eigenzuständen zu einem Wert von λ und verschiedenen Werten von m . Wegen der Ungleichung (5.4) muß diese Leiter zu großen wie zu kleinen m hin abbrechen, d.h. es gibt einen minimalen Wert $m_<$ und einen maximalen Wert $m_>$ von m sodaß†

$$\hat{L}_+|\lambda, m_>\rangle = 0, \quad \hat{L}_-|\lambda, m_<\rangle = 0.$$

Durch explizite Berechnung der c_\pm findet man, daß die Leiter symmetrisch um $m=0$ liegen muß,

$$m_> = -m_< \equiv j \geq 0, \quad (5.8)$$

was als Definition von j anzusehen ist. Weiterhin gilt

$$\lambda = j(j+1). \quad (5.9)$$

Da $m_>$ und $m_<$ durch Anwendung der Leiteroperatoren in einer endlichen Zahl von ganzzahligen Schritten verbunden sind, muß $m_> - m_< = 2j$ eine ganze Zahl sein. Es gibt zwei Möglichkeiten, diese Forderung zu erfüllen:

- (i) j ist ganzzahlig, $j = 0, 1, 2, 3, \dots$. Diese Möglichkeit ist realisiert beim (hier primär interessierenden) Bahndrehimpuls, und beim *Spin*‡ von *Bosonen*§.
- (ii) j ist halbzahlig, $j = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$. Diese Möglichkeit ist realisiert beim Spin von *Fermionen*, insbesondere beim Elektron mit $j = 1/2$.

† D.h. $c_+(\lambda, m_>) = c_-(\lambda, m_<) = 0$.

‡ Der Spin ist eine Art "Eigendrehimpuls" von Elementarteilchen, dessen Ursprung man erst im Rahmen der relativistischen Dirac-Gleichung richtig versteht (s. Kapitel 7). Wolfgang Pauli nennt den Spin des Elektrons 1925 eine "eigentümliche, klassisch nicht beschreibbare Zweideutigkeit". Im Kontext dieses Kapitels ist nur wichtig, daß die Spinoperatoren (wie in den Übungen gezeigt) die Vertauschungsrelationen von Drehimpulskomponenten erfüllen.

§ S. dazu Kapitel 6.

Wir fassen zusammen: Die (dimensionslosen) Eigenwerte λ von \vec{L}_{op}^2 und m von \hat{L}_z sind gegeben durch

$$\lambda = j(j+1), \quad -j \leq m \leq j. \quad (5.10)$$

Daraus folgt insbesondere, daß sich der quantenmechanische Drehimpuls (im Gegensatz zu seinem klassischen Pendant) nicht vollständig in eine Richtung (z.B. die z -Richtung) ausrichten läßt. Bei gegebenem j gilt nämlich

$$\langle \lambda, m | \hat{L}_z^2 | \lambda, m \rangle = m^2 \leq j^2 < j(j+1) = \langle \lambda, m | \vec{L}_{\text{op}}^2 | \lambda, m \rangle.$$

Dies ist eine Folge der Nichtvertauschbarkeit von \hat{L}_x und \hat{L}_y , die (wie in (3.16) gezeigt) eine Unschärferelation der Form

$$\Delta L_x \cdot \Delta L_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{L}_z \rangle| \quad (5.11)$$

zur Folge hat. Gäbe es einen Zustand, in dem $\langle \hat{L}_z^2 \rangle = \langle \vec{L}_{\text{op}}^2 \rangle$, so wären in diesem Zustand sowohl L_x als auch L_y exakt gleich Null, was wegen (5.11) nicht sein kann.

5.1.2. Eigenfunktionen. Wir stellen die Eigenzustände $|\lambda, m\rangle$ durch Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators in Kugelkoordinaten (r, φ, ϑ) dar. Die Verbindung zu den kartesischen Koordinaten lautet wie üblich

$$x = r \cos \varphi \sin \vartheta, \quad y = r \sin \varphi \sin \vartheta, \quad z = r \cos \vartheta, \quad r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

Daraus folgt

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \vec{L}_{\text{op}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right), \quad (5.12)$$

und wir suchen gemeinsame Eigenfunktionen $Y_{\lambda, m}(\vartheta, \varphi)$ von \hat{L}_z und \vec{L}_{op}^2 . Das Eigenwertproblem für \hat{L}_z ist einfach:

$$\hat{L}_z Y_{\lambda, m} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{\lambda, m} = \hbar m Y_{\lambda, m} \Rightarrow Y_{\lambda, m}(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} f_{\lambda, m}(\vartheta) \quad (5.13)$$

mit einer noch zu bestimmenden Funktion $f_{\lambda, m}(\vartheta)$. Daraus sieht man sofort, warum m (und damit auch j) in diesem Fall ganzzahlig sein sollte: Nur dann ist die Eigenfunktion unter Drehungen von 2π um die z -Achse invariant, $Y_{\lambda, m}(\vartheta, \varphi + 2\pi) = Y_{\lambda, m}(\vartheta, \varphi)$. Wir legen uns deshalb jetzt auf den Fall ganzzahliger j fest, und definieren $\ell \equiv j$ als *Quantenzahl des Bahndrehimpulses*. Entsprechend benennen wir die Eigenfunktionen um in $Y_{\ell m}$. Dies sind die *Kugelflächenfunktionen*

$$Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = A_{\ell m} e^{im\varphi} P_{\ell m}(\cos \vartheta)$$

mit Normierungskonstanten $A_{\ell, m}$ und den *zugeordneten Legendre-Polynomen*

$$P_{\ell m}(y) \sim (1-y^2)^{m/2} \frac{d^{\ell+m}}{dy^{\ell+m}} (y^2-1)^\ell, \quad -1 \leq y \leq 1.$$

So ist z.B. Y_{00} die konstante Funktion, $Y_{10} \sim \cos \vartheta$, $Y_{1\pm 1} \sim \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}$, $Y_{20} \sim 3 \cos^2 \vartheta - 1$. Einige der Kugelflächenfunktionen sind in Abb.10 dargestellt.

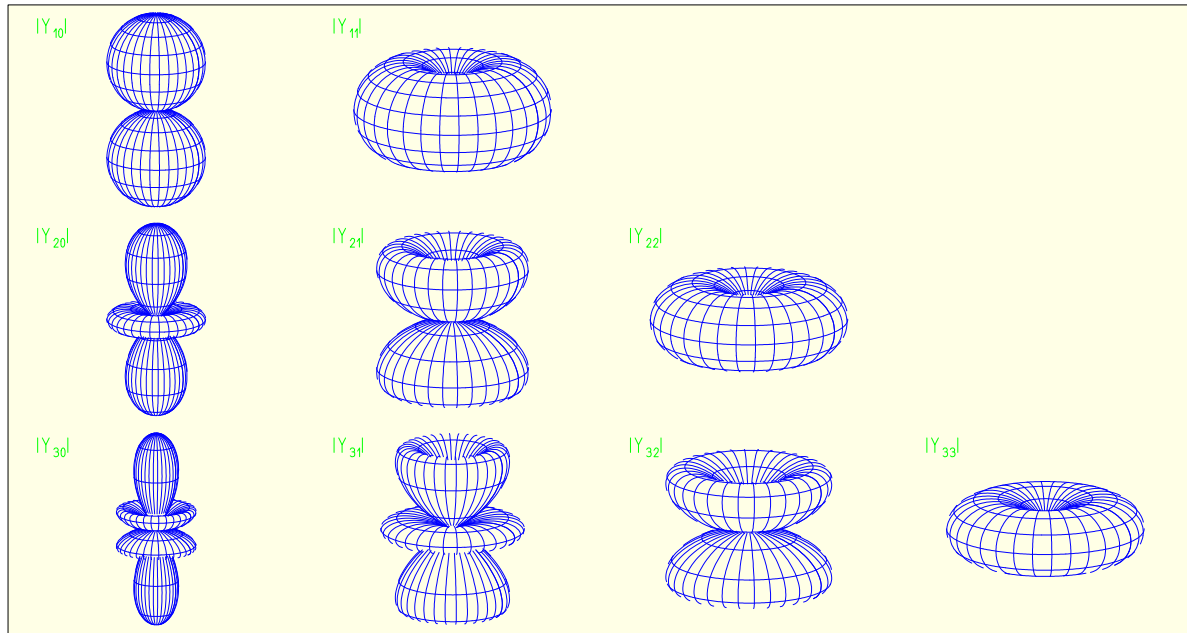


Abbildung 10. Absolutbetrag $|Y_{\ell m}|$ der Kugelflächenfunktionen mit $\ell = 1, 2, 3$ in polarer Darstellung. Das Bild wurden erzeugt mit dem Programm INTERQUANTA (S. Brandt, H.D. Dahmen, T. Stroh, *Interactive Quantum Mechanics*, Springer 2003).

5.2. Das Wasserstoffatom

5.2.1. *Radiale Schrödinger-Gleichung.* Wir kehren zurück zum Hamilton-Operator (5.1) und schreiben den Laplace-Operator ∇^2 in Kugelkoordinaten um. Dies ergibt

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{L}_{\text{op}}^2}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r}. \quad (5.14)$$

Der erste Term wirkt nur auf die Radialkoordinate und beschreibt die kinetische Energie der Radialbewegung, der zweite Term wirkt nur auf die Winkelvariablen ϑ, φ (s.(5.12)) und beschreibt die kinetische Energie der Azimuthalbewegung. Wie beim klassischen Kepler-Problem ist der Drehimpuls wegen der Rotationssymmetrie erhalten; hier bedeutet dies, daß die Drehimpulsoperatoren mit \hat{H} vertauschen||,

$$[\vec{L}_{\text{op}}^2, \hat{H}] = [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0.$$

Wir suchen gemeinsame Eigenfunktionen von \hat{H} , \vec{L}_{op}^2 und \hat{L}_z , und machen für die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung den Produktansatz

$$u(r, \vartheta, \varphi) = \mathcal{R}_{\ell m}(r) Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) \quad (5.15)$$

mit einer noch zu bestimmenden *radialen Wellenfunktion* $R_{\ell m}(r)$. Da die Kugelflächenfunktionen $Y_{\ell m}$ Eigenfunktionen von L_{op}^2 sind, wirkt der entsprechende Term in (5.14) multiplikativ auf die Wellenfunktion (5.15). Wir können deshalb in

|| Allgemein ist eine quantenmechanische Observable A genau dann eine Erhaltungsgröße, wenn der zugehörige Operator \hat{A} mit dem Hamilton-Operator vertauscht.

der stationären Schrödinger-Gleichung $\hat{H}u = Eu$ die $Y_{\ell m}$ auf beiden Seiten kürzen und erhalten die *radiale Schrödinger-Gleichung*

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right) \mathcal{R}_{\ell m} = E \mathcal{R}_{\ell m}. \quad (5.16)$$

Die Gleichung hängt nicht von m ab, weshalb wir den entsprechenden Index im folgenden unterdrücken. Mit der Transformation $\chi_\ell(r) = r \mathcal{R}_\ell(r)$ wird

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \mathcal{R}_\ell = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \chi_\ell(r),$$

und nach Multiplikation beider Seiten mit r nimmt (5.16) die Form einer *eindimensionalen* Schrödinger-Gleichung an,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \chi_\ell'' + V_{\text{eff}}(r) \chi_\ell = E \chi_\ell. \quad (5.17)$$

In völliger Analogie zum klassischen Fall haben wir damit das Problem auf eine eindimensionale Bewegung im *effektiven Potential*

$$V_{\text{eff}}(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{r} \quad (5.18)$$

reduziert, das sich aus dem Coulomb-Potential und dem Zentrifugalpotential zusammensetzt \mathbb{P} .

5.2.2. Energiespektrum und Entartung. Die Lösung des Eigenwertproblems (5.17) liefert das Energiespektrum

$$E_n = -\frac{Z^2 \mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \approx -\frac{Z^2}{n^2} \times 13.6 \text{ eV}, \quad (5.19)$$

wobei die *Hauptquantenzahl* n die natürlichen Zahlen durchläuft, $n = 1, 2, 3, \dots$. Die Grundzustandsenergie E_1 hatten wir bereits in Abschnitt 1.6 abgeschätzt. Für einen gegebenen Wert der Drehimpulsquantenzahl ℓ sind die möglichen Werte von n

$$n = \ell + 1, \ell + 2, \ell + 3, \dots$$

Der Grundzustand hat somit $\ell = 0$, die zugehörige Wellenfunktion ist radialsymmetrisch (vgl. Abschnitt 5.1.2). In der spektroskopischen Notation bezeichnet man die Eigenzustände mit $\ell = 0$ als *s-Orbitale*, mit $\ell = 1$ als *p-Orbitale*, mit $\ell = 2$ als *d-Orbitale* und mit $\ell = 3$ als *f-Orbitale*. Der Zustand $|n = 1, \ell = 0\rangle$ heißt so z.B. 1s-Zustand, der Zustand $|n = 2, \ell = 2\rangle$ 2p-Zustand usw.

Die Eigenfunktionen mit $\ell > 0$ und $n \geq 2$ sind *entartet*, d.h. es gibt mehrere Eigenfunktionen zum gleichen Eigenwert E_n . Genauer gesagt gibt es

- zu jedem Zustand mit Gesamtdrehimpuls $\hbar \ell$ $2\ell + 1$ Eigenfunktionen $Y_{\ell m}$ von \hat{L}_z mit Eigenwerten $\hbar m$ und $-\ell \leq m \leq \ell$ (s. Abschnitt 5.1.1),

\mathbb{P} Im Gegensatz zum klassischen Kepler-Problem sind hier auch die Lösungen mit $\ell = 0$ von physikalischem Interesse.

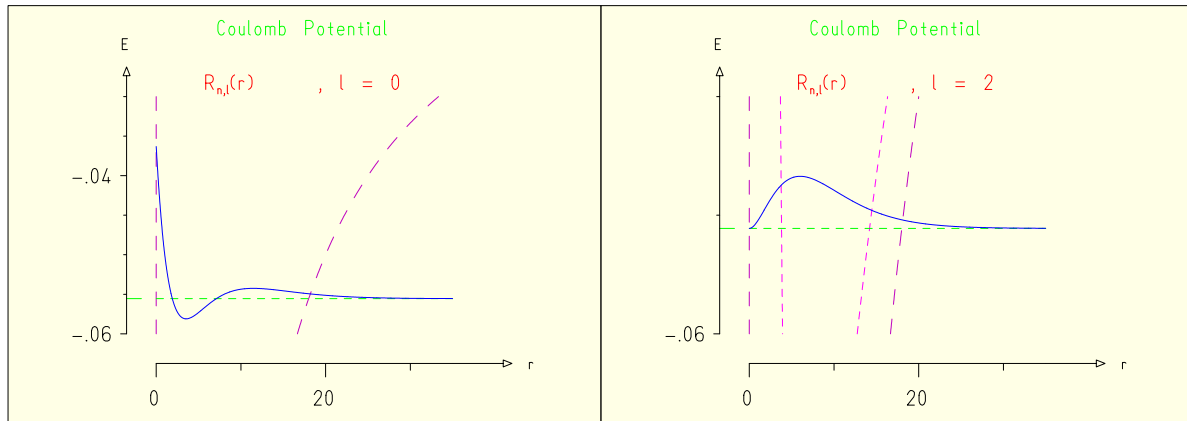


Abbildung 11. Radiale Eigenfunktionen $R_{n\ell}$ des Wasserstoffproblems mit $n = 3$ und $\ell = 0$ (links) und $\ell = 2$ (rechts). Die gestrichelten Linien zeigen den Verlauf des Coulomb-Potentials, die kurz gestrichelte Linie im rechten Bild zusätzlich das effektive Potential. Für $r \rightarrow 0$ verhalten sich die Wellenfunktionen wie $R_{n\ell} \sim r^\ell$. Die Bilder wurden erzeugt mit dem Programm INTERQUANTA (S. Brandt, H.D. Dahmen, T. Stroh, *Interactive Quantum Mechanics*, Springer 2003).

- und zu jedem Energieeigenwert E_n n Drehimpulszustände $\ell = 0, \dots, n - 1$.

Insgesamt ist der Entartungsgrad somit

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 2 \frac{n(n-1)}{2} + n = n^2.$$

Die Entartung kann durch verschiedene (extrinsische und intrinsische) Mechanismen aufgehoben werden, die wir im folgenden kurz skizzieren.

- Zeeman-Effekt.* Ein äußeres Magnetfeld wirkt auf das mit L_z verknüpfte magnetische Moment des Elektrons und führt so zu einer Aufspaltung der Eigenwerte zu verschiedenen m ; man bezeichnet m deshalb auch als *magnetische* Quantenzahl.
- Spin-Bahn-Kopplung.* In der relativistischen Beschreibung durch die Dirac-Gleichung⁺ ist der Bahndrehimpuls \vec{L} keine Erhaltungsgröße mehr. Erhalten ist nur noch der Gesamtdrehimpuls $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, der sich aus Bahndrehimpuls und Spin \vec{S} zusammensetzt, und man sucht gemeinsame Eigenzustände $|n, j\rangle$ des Dirac'schen Hamilton-Operators und \vec{J}_{op} . Dies führt zu einer Aufspaltung der entarteten Energieniveaus, die man als *Feinstruktur* bezeichnet. So werden z.B. die entarteten 2s- und 2p-Zustände ersetzt durch nicht-entartete Eigenzustände $|n = 2, j = 1/2\rangle$ und $|n = 2, j = 3/2\rangle$.
- (iii) Die *Hyperfeinstruktur* ergibt sich in ähnlicher Weise aus der Kopplung zwischen dem Bahndrehimpuls und dem Spin des Atomkerns.

⁺ S. Kapitel 7.

5.2.3. *Radiale Eigenfunktionen.* Die Eigenfunktionen $R_{nl}(r) = r\chi_{nl}(r)$ der radialen Schrödinger-Gleichung sind von der Form

$$R_{nl}(r) = A_{nl} r^\ell e^{-Zr/nr_0} \mathcal{L}_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(Zr/r_0). \quad (5.20)$$

Hier bezeichnet $r_0 = \hbar^2/me^2$ den Bohr'schen Radius (s. auch Abschnitt 1.6), $\mathcal{L}_k^{(2\ell+1)}$ ist ein Laguerre-Polynom vom Grade k , und A_{nl} eine Normierungskonstante. Die Funktion R_{nl} verschwindet für kleine r proportional zu r^ℓ und fällt für große Abstände exponentiell ab auf der Längenskala nr_0/Z . Zwei Beispiele sind in Abb.11 dargestellt.

5.3. Spektrallinien und Atombau

5.3.1. *Spektrallinien.* Zu Beginn des 20. Jahrhunderts lagen große Mengen von spektroskopischen Daten in Form von Linienspektren vor, die im Rahmen der Quantentheorie erstmals systematisch interpretiert werden konnten. Spektrallinien entstehen beim Übergang eines Elektrons von einem Eigenzustand in einen anderen unter Emission oder Absorption eines Photons. Bezeichnen wir die Energien der beteiligten Eigenzustände mit E und $E' > 0$, so folgt aus der Forderung nach Energieerhaltung[†]

$$E' - E = \hbar\omega, \quad (5.21)$$

wobei ω die Frequenz des emittierten oder absorbierten Photons ist. Die Energieeigenwerte des Wasserstoffatoms sind von der Form $E = E_1/n^2$, $E' = E_1/(n')^2$ mit $E_1 < 0$ (s. (5.19)), und wir wählen $n' > n$. Aus (5.21) folgt dann für die Wellenlänge λ der emittierten oder absorbierten Strahlung

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n')^2} \right) \quad (5.22)$$

mit der *Rydberg-Konstanten*

$$R = -\frac{E_1}{\hbar c} = \frac{e^2}{4\pi r_0 \hbar c}.$$

Mit $n = 1$ (Übergänge in den Grundzustand) beschreibt (5.22) die Lyman-Serie, mit $n = 2$ die Balmer-Serie von Spektrallinien.

Nicht alle Übergänge zwischen Eigenzuständen $|n, \ell, m\rangle$ und $|n', \ell', m'\rangle$ sind möglich. Sie unterliegen vielmehr *Auswahlregeln* an die Drehimpuls-Quantenzahlen der beteiligten Zustände, die die Forderung der Drehimpulserhaltung ausdrücken. Da das Photon ein Spin-1-Teilchen ist, erfüllen erlaubte Übergänge[‡] die Bedingungen

$$\Delta\ell = \ell - \ell' = \pm 1, \quad \Delta m = m - m' = 0 \text{ oder } \pm 1. \quad (5.23)$$

So sind z.B. Übergänge zwischen s-Zuständen ($\ell = \ell' = 0$) verboten.

[†] Eine quantitative Behandlung von Emissions- und Absorptionsprozessen erfolgt im Rahmen der zeitabhängigen Störungstheorie. Die Rechnung zeigt, daß die Beziehung (5.21) nur für hinreichend lange Wechselwirkungszeiten streng erfüllt ist. Im allgemeinen findet man eine 'Energie-Zeit Unschärferelation' von der Form $\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar$, wobei ΔE die Abweichung vom Energiesatz (5.21) bezeichnet und Δt die Wechselwirkungszeit des elektromagnetischen Feldes mit dem Atom.

[‡] "Verbotene" Übergänge, die die Auswahlregeln (5.23) verletzen, finden entweder überhaupt nicht statt oder mit deutlich geringeren Übergangsraten.

5.3.2. *Schalenmodell des Atoms.* Vernachlässigt man die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Elektronen, so kann der Grundzustand eines Atom mit Z Elektronen “konstruiert” werden, indem die Energie-Eigenzustände des Kernpotentials $-Ze^2/r$ nach und nach mit Elektronen aufgefüllt werden. Dabei ist das *Pauli-Prinzip* zu berücksichtigen[§]:

Zwei Fermionen können niemals den gleichen Quantenzustand besetzen.

Da der Elektronenspin zwei Einstellmöglichkeiten erlaubt ($S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$), kann jeder der in Abschnitt 5.2 diskutierten Eigenzustände $|n, \ell, m\rangle$ mit 2 Elektronen besetzt werden. Die Besetzung des Grundzustands ($n = 1$, K-Schale) mit zwei Elektronen ergibt das Helium-Atom. Die Besetzung der 4 Zustände der L-Schale ($n = 2$) produziert die Elemente von Lithium bis Neon ($Z = 3 - 10$). Dabei werden aufgrund von Spin-Bahn-Kopplung (Abschnitt 5.2.2) und Abschirmungseffekten^{||} zunächst die 2s-Zustände und danach die 2p-Zustände besetzt. Analog folgt von $Z = 11$ (Natrium) bis $Z = 18$ (Argon) die Besetzung der 3s- und 3p-Zustände der M-Schale ($n = 3$), danach werden allerdings die 4s-Zustände vor den 3d-Zuständen besetzt.

5.4. Streuzustände

Analog zum Kastenpotential aus Abschnitt 4.3 besitzt auch der Hamilton-Operator (5.1) Streuzustände mit kontinuierlicher Energie $E > 0$. In der dreidimensionalen Streugeometrie wird der (entlang der z -Achse) einfallende Teilchenstrahl durch eine ebene Welle $u_{\text{ein}} \sim e^{ikz}$ beschrieben und der gestreute Anteil durch eine Kugelwelle^ℙ

$$u_{\text{aus}} \sim \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (5.24)$$

wobei die Radialkoordinate r vom Streuzentrum aus gemessen wird. Die Wellenzahl k ist über die übliche Beziehung $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ mit der Energie E verknüpft. Die Überlagerung von einlaufender und auslaufender Wellenfunktion führt so auf den Ansatz

$$u(r, \vartheta, \varphi) = A \left(e^{ikz} + f(\vartheta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \quad (5.25)$$

für die Lösung der vollen, stationären Schrödinger-Gleichung, der außerhalb des Potentialbereichs gelten soll. Die *Streuamplitude* $f(\vartheta, \varphi)$ enthält die Information über die Struktur des Streuzentrums.

In Streuexperimenten mißt man den *differentiellen Streuquerschnitt* $\frac{d\sigma}{d\Omega}$. Dabei bezeichnet $d\sigma$ die Zahl der gestreuten Teilchen, die pro Zeiteinheit durch ein

§ Eine systematische Begründung des Pauli-Prinzips folgt in Kap. 6.

|| Damit ist gemeint, daß das Coulomb-Potential des Kerns für die äußeren Elektronen durch die Ladungsdichte der inneren Elektronen abgeschwächt wird. Die Größe dieses Effekts hängt von der Ladungsdichteverteilung, und damit von den Drehimpulsquantenzahlen ab.

ℙ Man überzeugt sich leicht davon, daß (5.24) eine Lösung der freien Schrödinger-Gleichung ist. Die $\frac{1}{r}$ -Abhängigkeit sorgt dafür, daß der zugehörige Wahrscheinlichkeitsstrom (2.16) proportional zu $1/r^2$ ist. Die Integration über eine Kugelschale vom Radius r ergibt somit eine Konstante, d.h. die Wahrscheinlichkeit ist erhalten.

infinitesimales Flächenelement dF einer Kugelschale vom Radius r laufen, bezogen auf den einlaufenden Strom. Das Flächenelement ist von der Form

$$dF = r^2 d\Omega, \quad d\Omega = \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi$$

mit dem Raumwinkelelement $d\Omega$. Aus dem Ansatz (5.25) folgt die zentrale Beziehung

$$\frac{d\sigma}{dF} = |f(\vartheta, \varphi)|^2 \quad (5.26)$$

zwischen Streuquerschnitt und Streuamplitude. Für die Streuung am Coulomb-Potential ergibt sich die *Rutherford'sche Streuformel*

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 \mu^2 e^4}{4(\hbar k)^4 \sin^4(\vartheta/2)}. \quad (5.27)$$

Dieser Ausdruck wurde 1913 von Rutherford auf rein klassischem Wege hergeleitet und überstand erstaunlicherweise den Übergang zur Quantenmechanik völlig unverändert.

6. Mehrteilchensysteme

6.1. Die Mehrteilchen-Wellenfunktion

In diesem Kapitel gehen wir von der Einteilchen-Quantenmechanik über zur quantenmechanischen Beschreibung von Systemen aus mehreren Teilchen. Als einfaches und relevantes Beispiel betrachten wir das Helium-Atom, also zwei Elektronen im Coulomb-Potential des Atomkerns. Die klassische Beschreibung basiert auf den Orten \vec{r}_1, \vec{r}_2 und Impulsen \vec{p}_1, \vec{p}_2 der Elektronen. Die Hamilton-Funktion lautet (mit dem Kern bei $\vec{r} = 0$)

$$H = \frac{|\vec{p}_1|^2}{2m} + \frac{|\vec{p}_2|^2}{2m} - \frac{2e^2}{|\vec{r}_1|} - \frac{2e^2}{|\vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}, \quad (6.1)$$

wobei der letzte Term die gegenseitige Abstoßung der beiden Elektronen beschreibt. Mit den üblichen Ersetzungsregeln wird aus (6.1) der Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{|\vec{r}_1|} - \frac{2e^2}{|\vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}. \quad (6.2)$$

Hier bezeichnet ∇_1 bzw. ∇_2 die Gradientenbildung bezüglich \vec{r}_1 bzw. \vec{r}_2 ,

$$\nabla_1 = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial y_1}, \frac{\partial}{\partial z_1} \right), \quad \nabla_2 = \left(\frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial y_2}, \frac{\partial}{\partial z_2} \right).$$

Der Hamilton-Operator (6.2) wirkt auf eine Wellenfunktion $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$, die von insgesamt 6 Ortskoordinaten abhängt. Die Wellenfunktion ist nicht im (3-dimensionalen) Ortsraum, sondern im 6-dimensionalen *Konfigurationsraum* definiert. Für ein System von N Teilchen wäre der Konfigurationsraum entsprechend $3N$ -dimensional.

Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation aus Abschnitt 2.2 überträgt sich in natürlicher Weise:

$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2$ ist die *gemeinsame* Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte der beiden Teilchen, d.h. die Wahrscheinlichkeit, Teilchen 1 in einem infinitesimalen Volumenelement d^3r_1 um den Punkt \vec{r}_1 und Teilchen 2 in einem infinitesimalen Volumenelement d^3r_2 um den Punkt \vec{r}_2 anzutreffen ist $|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2 d^3r_1 d^3r_2$.

Wir illustrieren diesen Punkt anhand des einfachen Beispiels von unabhängigen Teilchen. Vernachlässigt man in (6.2) die Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen, so bekommt der Hamilton-Operator die Form

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2, \quad \hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{2e^2}{|\vec{r}_i|}, \quad i = 1, 2.$$

Da \hat{H}_i nur auf \vec{r}_i wirkt, läßt sich die stationäre Zweiteilchen-Schrödingergleichung

$$\hat{H}u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = Eu(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (6.3)$$

durch den Produktansatz

$$u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = u_1(\vec{r}_1)u_2(\vec{r}_2) \quad (6.4)$$

lösen, wobei u_1 bzw. u_2 Eigenfunktionen von \hat{H}_1 bzw. \hat{H}_2 mit Eigenwerten E_1 und E_2 sein sollen. In der Tat folgt dann

$$\hat{H}u = (\hat{H}_1 + \hat{H}_2)u_1u_2 = u_2(\hat{H}_1u_1) + u_1(\hat{H}_2u_2) = (E_1 + E_2)u_1u_2,$$

d.h. (6.4) löst (6.3) mit $E = E_1 + E_2$. Die gemeinsame Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist in diesem Fall

$$|u(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |u_1(\vec{r}_1)|^2 |u_2(\vec{r}_2)|^2. \quad (6.5)$$

Die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der beiden Teilchen multiplizieren sich, wie bei unabhängigen Ereignissen üblich. Wir werden aber im folgenden sehen, daß der Produktansatz (6.4) i.a. auch bei nicht-wechselwirkenden Teilchen *nicht* gerechtfertigt ist.

6.2. Ununterscheidbarkeit

In der klassischen Physik sind auch identische Teilchen (die sich also in Bezug auf Eigenschaften wie Masse, Ladung und ggf. räumliche Ausdehnung nicht unterscheiden lassen) grundsätzlich unterscheidbar, da ihnen zu jedem Zeitpunkt ein scharf definierter Ort zugeordnet werden kann. Diese Eigenschaft geht in der Quantenmechanik verloren: Wenn zwei quantenmechanische Wellenpakete zu einem bestimmten Zeitpunkt überlappen, läßt sich danach nicht mehr entscheiden, welches Teilchen welche Trajektorie genommen hat.

In der Quantenmechanik sind identische Teilchen (wie z.B. Elektronen) grundsätzlich ununterscheidbar. Die Aussage

“Elektron 1 befindet sich am Ort \vec{r}_1 und Elektron 2 am Ort \vec{r}_2 ”

ist sinnlos; man kann lediglich feststellen, daß sich je ein Elektron bei \vec{r}_1 und bei \vec{r}_2 befindet. Die gemeinsame Aufenthaltswahrscheinlichkeit von zwei Teilchen muß deshalb symmetrisch unter der Vertauschung der beiden Teilchen sein, d.h.†

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2. \quad (6.6)$$

Um zu sehen, was daraus für die Wellenfunktion folgt, führen wir den *Permutationsoperator* \hat{P}_{12} ein, der die beiden Argumente von ψ vertauscht,

$$\hat{P}_{12}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (6.7)$$

Für identische Teilchen (z.B. die beiden Elektronen im Helium-Atom) vertauscht der Hamilton-Operator des Systems mit dem Permutationsoperator,

$$[\hat{H}, \hat{P}_{12}] = 0.$$

Aus den allgemeinen Überlegungen von Abschnitt 3.3 folgt, daß gemeinsame Eigenfunktionen von \hat{H} und \hat{P}_{12} gefunden werden können. Um die möglichen Eigenwerte λ_P von \hat{P}_{12} zu bestimmen, bemerken wir, daß

$$(\hat{P}_{12})^2\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \hat{P}_{12}\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2),$$

d.h. $(\hat{P}_{12})^2$ ist der Einheitsoperator. Die Eigenwerte erfüllen entsprechend die Gleichung $\lambda_P^2 = 1$, mit zwei Lösungen:

$\lambda_P = 1$: Die Wellenfunktion ist *symmetrisch* unter Vertauschungen,

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (6.8)$$

Teilchen mit dieser Eigenschaft heißen *Bosonen*‡.

$\lambda_P = -1$: Die Wellenfunktion ist *antisymmetrisch* unter Vertauschungen,

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (6.9)$$

Teilchen mit dieser Eigenschaft heißen *Fermionen*§.

Diese Klassifikation läßt sich leicht auf Systeme von N Teilchen verallgemeinern. In diesem Fall definiert man Permutationsoperatoren \hat{P}_{ij} , die in der N -Teilchen-Wellenfunktion Ψ_N die Vertauschung der Teilchen i und j bewirken,

$$\hat{P}_{ij}\Psi_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_N) = \Psi_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N).$$

Eine bosonische Wellenfunktion ist symmetrisch unter Vertauschungen, $\hat{P}_{ij}\Psi_N = \Psi_N$ für beliebige $i \neq j$, eine fermionische Wellenfunktion ist antisymmetrisch, $\hat{P}_{ij}\Psi_N = -\Psi_N$.

Wir haben in Abschnitt 5.1 bemerkt, daß Bosonen und Fermionen sich auch in ihren Spin-Eigenschaften unterscheiden. Diesen Zusammenhang stellt das von Wolfgang Pauli 1940 bewiesene *Spin-Statistik-Theorem*|| her:

† Das Zeitargument der Wellenfunktion wird im folgenden unterdrückt.

‡ Benannt nach S.N. Bose.

§ Benannt nach E. Fermi.

|| Der Begriff "Statistik" bezieht sich hier auf das unterschiedliche Verhalten von fermionischen und bosonischen Vielteilchensystemen im Rahmen der statistischen Mechanik, das im zweiten Teil der Vorlesung genauer untersucht wird.

Teilchen mit ganzzahligem Spin sind Bosonen, Teilchen mit halbzahligem Spin sind Fermionen.

Das Spin-Statistik-Theorem ist eine Aussage der relativistischen Quantenfeldtheorie und läßt sich mit elementaren Mitteln nicht wirklich begründen. Wir skizzieren hier ein anschauliches Argument, das einen Zusammenhang zwischen dem Spin und dem Verhalten der Wellenfunktion unter Vertauschungen zumindest plausibel macht^ℙ.

Wir gehen aus von der Beobachtung, daß die Eigenfunktionen von \hat{L}_z von der Form $Y_{\ell m} \sim e^{im\varphi}$ sind (s. (5.13)). Wenn m ganzzahlig ist, folgt daraus, daß die Wellenfunktion unter einer Drehung um 2π unverändert bleibt⁺,

$$Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi + 2\pi) = Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi).$$

Ist m halbzahlig, gilt stattdessen

$$Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi + 2\pi) = e^{i\pi} Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi) = -Y_{\ell m}(\vartheta, \varphi),$$

die Wellenfunktion ändert ihr Vorzeichen. Nun muß man noch argumentieren, daß die Vertauschung zweier Teilchen äquivalent ist zu einer relativen Drehung um 2π , was sich leicht durch Vertauschen der beiden Enden eines Bandes oder Gürtels demonstrieren läßt.

Wir geben noch einige Beispiele für beide Typen von Elementarteilchen an:

Fermionen sind die elementaren Bausteine der Materie wie Elektronen, Protonen, Neutronen oder Quarks. Ein wichtiges fermionisches Modellsystem aus dem Bereich der kondensierten Materie ist flüssiges ${}^3\text{He}$.

Bosonen treten oftmals als Quanten der elementaren Wechselwirkungen auf, wie z.B. das Photon, das die elektromagnetische Wechselwirkung vermittelt, die Gluonen der starken Wechselwirkung oder die Vektorbosonen der schwachen Wechselwirkung. Der bosonische Charakter ist auch verantwortlich für die exotischen Eigenschaften von flüssigem ${}^4\text{He}$.

In zweidimensionalen Systemen sind neben Fermionen und Bosonen auch Teilchen mit allgemeinerem Verhalten unter Vertauschung denkbar. Bei diesen sogenannten *Anyonen* wird die Wellenfunktion bei Vertauschung mit einem allgemeinen Phasenfaktor multipliziert,

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i\alpha} \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \quad \text{mit} \quad \alpha \neq 0, \pi,$$

was mit der Symmetrieforderung (6.6) an die Aufenthaltswahrscheinlichkeit verträglich ist. Diese Art von "fraktionaler Statistik" ist bei den Quasiteilchen des fraktionalen Quanten-Hall-Effekts realisiert*.

^ℙ Nach R.P. Feynman, *Elementary Particles and the Laws of Physics: the 1986 Dirac memorial lectures* (Cambridge University Press, 1987) S.48 ff.

⁺ In Abschnitt 5.1 war diese Eigenschaft benutzt worden, um zu begründen, warum die Quantenzahlen des Bahndrehimpulses ganzzahlig sein müssen.

* Der Quanten-Hall-Effekt tritt in zweidimensionalen Elektronensystemen auf, die einem starken

6.3. Pauli-Prinzip und statistische Wechselwirkung

Wir illustrieren die Konsequenzen der Symmetrieforderungen (6.8) und (6.9) anhand des einfachen Beispiels von zwei nicht-wechselwirkenden Teilchen in einer Dimension, die sich in einem Potential $V(x)$ bewegen (z.B. einem Kastenpotential oder dem Potential des harmonischen Oszillators). Der Hamilton-Operator ist

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V(x_1) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_2).$$

Die Eigenfunktionen des Einteilchen-Operators seien bekannt,

$$\hat{H}_i u_n(x_i) = E_n u_n(x_i), \quad i = 1, 2.$$

Wir wissen aus Abschnitt 6.1, daß die stationäre Schrödinger-Gleichung des Zweiteilchenproblems durch Produktzustände der Form

$$u_{nm}(x_1, x_2) = u_n(x_1)u_m(x_2)$$

gelöst wird. Diese Zustände sind aber (für $n \neq m$) weder symmetrisch noch antisymmetrisch unter Vertauschung, und somit zur Beschreibung von ununterscheidbaren Teilchen nicht geeignet. Wir müssen die Wellenfunktionen durch Überlagerung von Produktzuständen *symmetrisieren* bzw. *antisymmetrisieren*. Das Ergebnis lautet im bosonischen Fall

$$u_{nm}^{(S)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_n(x_1)u_m(x_2) + u_n(x_2)u_m(x_1)], \quad (6.10)$$

und im fermionischen Fall

$$u_{nm}^{(A)}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_n(x_1)u_m(x_2) - u_n(x_2)u_m(x_1)]. \quad (6.11)$$

Diese Funktionen drücken aus, daß sich je ein Teilchen im Zustand m und im Zustand n befindet. Sie sind offensichtlich symmetrisch bzw. antisymmetrisch unter Vertauschungen, und sie lösen als Linearkombination von Produktzuständen mit Energie $E_n + E_m$ die stationäre Zweiteilchen-Schrödingergleichung. Der Faktor $\frac{1}{\sqrt{2}}$ sorgt (für $n \neq m$) für die richtige Normierung der Zweiteilchen-Wellenfunktion \ddagger .

Die Tatsache, daß die Wellenfunktionen (6.10) und (6.11) keine Produktstruktur haben, bedeutet, daß die Teilchen (obwohl sie nicht wechselwirken) nicht unabhängig voneinander sind. Wir diskutieren die durch die Symmetrieforderung induzierten Korrelationen getrennt für die beiden Fälle.

Magnetfeld ausgesetzt werden. Der ganzzahlige Quanten-Hall-Effekt wurde 1980 von Klaus von Klitzing entdeckt und 1985 mit dem Nobelpreis ausgezeichnet. Ein weiterer Nobelpreis ging 1998 an Horst Störmer, Daniel Tsui und Robert Laughlin für die Entdeckung und theoretische Erklärung des fraktionalen Quanten-Hall-Effekts.

\ddagger Zum Beweis benutzt man die Orthogonalität der Einteilchen-Eigenfunktionen u_n .

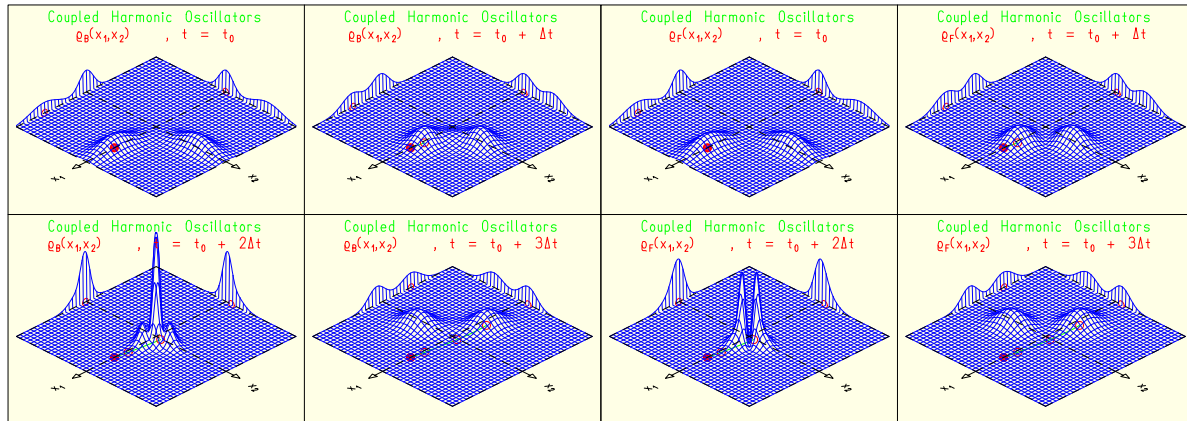


Abbildung 12. Gemeinsame Aufenthaltswahrscheinlichkeit von zwei harmonisch gebundenen Bosonen (links) bzw. Fermionen (rechts) in einer Dimension. Man beachte die Symmetrie (6.6) der Aufenthaltswahrscheinlichkeit unter Spiegelung an der Diagonalen $x_1 = x_2$. Bei der Begegnung der beiden Teilchen am Ursprung ist die gemeinsame Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Bosonen überhört, bei den Fermionen ist sie stark unterdrückt. Die Bilder wurden erzeugt mit dem Programm INTERQUANTA (S. Brandt, H.D. Dahmen, T. Stroh, *Interactive Quantum Mechanics*, Springer 2003).

- *Fermionen:* Wir bemerken zunächst, daß $u_{nm}^{(A)}(x, x) = 0$, und damit auch $|u_{nm}^{(A)}(x, x)|^2 = 0$. Zwei identische Fermionen können sich nicht am gleichen Ort befinden, sie stoßen sich “statistisch” ab (s. rechtes Bild in Abb.12). Für $n = m$ verschwindet die Wellenfunktion (6.11) sogar identisch, $u_{nn}^{(A)}(x_1, x_2) \equiv 0$. Dies ist Ausdruck des bereits in Abschnitt 5.3.2 formulierten Pauli-Prinzips.
- *Bosonen:* In diesem Fall ist $u_{nm}^{(S)}(x, x) = \sqrt{2}u_n(x)u_m(x)$ und damit

$$|u_{nm}^{(S)}(x, x)|^2 = 2|u_n(x)|^2|u_m(x)|^2.$$

Die Wahrscheinlichkeit, beide Bosonen am gleichen Ort zu finden, ist *doppelt so groß* wie bei unabhängigen Teilchen (vgl. mit (6.5)); Bosonen ziehen sich statistisch an (linkes Bild in Abb.12). Befinden sich allerdings die beiden Teilchen im gleichen Zustand, $n = m$, so ist bereits die Produktwellenfunktion $u_n(x_1)u_n(x_2)$ symmetrisch, und die Teilchen sind unabhängig.

6.4. Bell'sche Ungleichung

Unperformed experiments have no results.

Asher Peres[†]

Einstein, Podolsky und Rosen (EPR)[‡] stellten 1935 die folgende Frage:

Ist die Quantenmechanik vollständig, oder gibt es *verborgene Variablen*, die eine deterministische Beschreibung quantenmechanischer Vorgänge erlauben würde?

Um nachzuweisen, daß die Quantenmechanik in diesem Sinne unvollständig ist, benutzten sie ein Gedankenexperiment, das wir hier in einer von Bohm und Aharanov[§] eingeführten Version diskutieren.

Wir betrachten ein System aus zwei Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen mit Gesamtspin $\vec{S} = 0$. Das System zerfällt und die beiden Teilchen fliegen auseinander, sodaß ihre Spins $\vec{S}^{(1)}$, $\vec{S}^{(2)}$ an zwei räumlich (weit) getrennten Stern-Gerlach-Detektoren[¶] SG1, SG2 gemessen werden können. Wir nehmen zunächst an, daß SG1 die Spinkomponente $S_z^{(1)}$ in z -Richtung misst, und SG2 die Spinkomponente $\vec{n} \cdot \vec{S}^{(2)}$ bezüglich einer zweiten Richtung, die durch den Einheitsvektor \vec{n} vorgegeben ist. Die möglichen Meßwerte sind in beiden Fällen $\pm \frac{\hbar}{2}$.

Wir untersuchen zwei Fälle:

- $\vec{n} = \vec{e}_z$, beide Spins werden bezüglich der z -Achse gemessen. Wegen $\vec{S} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)} = 0$ gilt $S_z^{(1)} = -S_z^{(2)}$, d.h. die Messungen sind perfekt antikorreliert. In einer auf Schrödinger zurückgehenden Begriffsbildung⁺ nennt man die Zustände der beiden Teilchen *verschränkt*; damit ist gemeint, daß eine Messung an einem Teilchen Informationen über den Zustand des zweiten liefert.
- Um das EPR-Paradoxon zu konstruieren, betrachten wir jetzt stattdessen den Fall $\vec{n} = \vec{e}_x$. Dann liefert die Messung von $\vec{S}^{(1)}$ den Wert von $S_x^{(1)}$ und die Messung von $\vec{S}^{(2)}$ den Wert von $S_x^{(2)}$. Wegen der perfekten Antikorrelation zwischen $S_z^{(1)}$ und $S_z^{(2)}$ können wir aus der Messung von $S_x^{(1)}$ auch auf den Wert von $S_z^{(2)} = -S_z^{(1)}$

[†] Unsere Behandlung der Thematik beruht auf dem gleichnamigen Artikel von Peres im *American Journal of Physics* **46**, 745 (1978). Empfehlenswert sind auch die Essays von David Mermin im Band *Boojums all the way through: Communicating science in a prosaic age*, Cambridge University Press 1990.

[‡] A. Einstein, B. Podolsky und N. Rosen, *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?*, *Physical Review* **47**, 777 (1935).

[§] D. Bohm, A. Aharanov, *Discussion of Experimental Proof for the Paradox of Einstein, Podolsky and Rosen*, *Physical Review* **108**, 1070 (1957).

[¶] Genauer: Das Zweiteilchen-System befindet sich in einem Singlett-Zustand, den wir in Dirac-Schreibweise in der Form $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2)$ schreiben können. Dabei bezeichnen die Pfeile die beiden Einstellmöglichkeiten der Spins (bzgl. einer beliebig gewählten Achse) und $|\uparrow\rangle_1$ bzw. $|\downarrow\rangle_2$ bezeichnen die Zustände der beiden Teilchen.

[¶] Für unsere Zwecke genügt es, zu wissen, daß ein Stern-Gerlach-Detektor mit Hilfe eines inhomogenen Magnetfelds die Spinkomponente eines Teilchens in einer beliebig vorzugebenden Richtung misst.

⁺ E. Schrödinger, *Die gegenwärtige Situation der Quantenmechanik*, *Die Naturwissenschaften* **23** (1935).

Z1	+	+	?	-	?	?	+	+	?	-
N1	?	?	-	?	+	+	?	?	+	?
Z2	-	?	?	+	+	?	?	?	-	+
N2	?	-	+	?	?	-	-	-	?	?

Tabelle 1. Ein mögliches Meßprotokoll. Die Ergebnisse der nicht durchgeführten Messungen sind mit Fragezeichen markiert. Man beachte, daß in denjenigen Fällen, in denen Z_1 und Z_2 gemessen wurden, die Werte perfekt antikorreliert sind, $Z_1 = -Z_2$.

schließen*. Damit haben wir in einer Messung Zugang zu den Werten der beiden Spinkomponenten $S_z^{(2)}$ und $S_x^{(2)}$, obwohl diese Größen wegen $[S_x^{(2)}, S_z^{(2)}] \neq 0$ nicht gleichzeitig scharf meßbar sein sollten.

EPR schließen daraus, daß beiden Spinkomponenten $S_z^{(2)}$ und $S_x^{(2)}$ objektive, reale Werte zugeordnet werden können. Da die Quantenmechanik dies nicht zuläßt, ist sie *unvollständig*.

John Bell hat diesen Gedanken aufgegriffen und die von der Quantenmechanik vorhergesagten Korrelationen zwischen den Messungen bei SG1 und SG2 eingehender untersucht‡. Grundlage seiner Überlegungen sind zwei Annahmen, die aus Sicht unseres Alltagsverständnisses sehr natürlich und offensichtlich sind:

- (i) *Lokalität*: Eine Messung bei SG1 kann eine Messung bei SG2 nicht beeinflussen.
- (ii) *Objektive Realität* im Sinne von EPR: Werte verschiedener Komponenten von $\vec{S}^{(1)}$ und $\vec{S}^{(2)}$ existieren, auch wenn sie nicht gemessen werden.

Unter diesen Voraussetzungen analysieren wir eine Verallgemeinerung des Gedankenexperiments von Bohm und Aharonov. Die Verallgemeinerung besteht darin, daß bei SG1 und SG2 wahlweise zwei verschiedene Komponenten der Spins gemessen werden können, und zwar

- bei SG1 die Komponente $S_z^{(1)}$ mit Ergebnis†† $Z_1 = \pm 1$ und die Komponente $\vec{n}_1 \cdot \vec{S}^{(1)}$ mit Ergebnis $N_1 = \pm 1$, und
- bei SG2 die Komponente $S_z^{(2)}$ mit Ergebnis $Z_2 = \pm 1$ und die Komponente $\vec{n}_2 \cdot \vec{S}^{(2)}$ mit Ergebnis $N_2 = \pm 1$.

Die Vektoren \vec{n}_1, \vec{n}_2 liegen in der $x-z$ -Ebene und schließen die Winkel θ_1, θ_2 mit der z -Achse ein. Der Einfachheit halber setzen wir $\theta_1 = -\theta_2 = \theta$. Die Wahl der zu messenden Spinkomponente kann z.B. an jedem Detektor zufällig erfolgen.

Tabelle 1 zeigt ein hypothetisches Meßprotokoll nach 10 solchen Experimenten. Von 4 möglichen Ergebnissen pro Experiment werden 2 tatsächlich gemessen, die anderen beiden sind in der Tabelle mit Fragezeichen markiert. Gemäß unseren Annahmen (i)

* Genauer: Wir schließen (vermeintlich) auf den Wert, den $S_z^{(2)}$ gehabt hätte, wenn man diese Komponente gemessen hätte.

‡ J.S. Bell, *On the Einstein-Podolsky-Rosen Paradox*, Physics **1**, 195 (1964).

†† In Einheiten von $\frac{\hbar}{2}$.

und (ii) sollte es aber im Prinzip möglich sein, die Tabelle zu vervollständigen, und die Ergebnisse der nicht durchgeführten Messungen nachzutragen (nach Annahme (ii) besitzen diese Ergebnisse eine objektive Realität). Wir nehmen also an, die Tabelle sei vollständig, sodaß zu jedem Experiment vier Meßwerte Z_1, N_1, Z_2, N_2 vorliegen. Wir interessieren uns nun für die *Korrelationen* zwischen den Messungen bei SG1 und SG2, und betrachten deshalb die folgende Kombination aus Produkten von Ergebnissen der beiden Detektoren:

$$C = Z_1 Z_2 + N_1 Z_2 + Z_1 N_2 - N_1 N_2 = (Z_1 + N_1) Z_2 + (Z_1 - N_1) N_2. \quad (6.12)$$

Nun gilt entweder $Z_1 = N_1$, sodaß $C = 2Z_2$, oder es gilt $Z_1 = -N_1$, sodaß $C = 2Z_1 N_2$. In jedem Fall kann C nur die Werte $C = \pm 2$ annehmen, und bei Mittelung über viele Messungen muß gelten

$$|\langle C \rangle| \leq 2. \quad (6.13)$$

Dies ist eine spezielle Form der Bell'schen Ungleichung[†]. Sie folgt, wie wir gesehen haben, allein aus der scheinbar völlig harmlosen Annahme, daß sich die Tabelle 1 im Prinzip vervollständigen läßt.

Wir zeigen jetzt, daß die Quantenmechanik die Ungleichung (6.13) verletzt. Wir gehen aus von dem aus den Übungen bekannten Ergebnis für die Wahrscheinlichkeit $P_{++}(\vartheta)$, an beiden SG-Detektoren den positiven Eigenwert der entsprechenden Spinkomponente zu messen, wenn die beiden Detektororientierungen den Winkel ϑ einschließen. Es gilt

$$P_{++}(\vartheta) = \frac{1}{4}(1 - \cos \vartheta). \quad (6.14)$$

Aus Symmetriegründen ist $P_{--} = P_{++}$, und aus der Normierung der Gesamtwahrscheinlichkeit folgt

$$P_{+-}(\vartheta) = P_{-+}(\vartheta) = \frac{1}{2}[1 - 2P_{++}(\vartheta)] = \frac{1}{4}(1 + \cos \vartheta). \quad (6.15)$$

Damit ist die normierte Korrelationsfunktion zwischen Messungen der Spinkomponenten $S^{(1)}$ und $S^{(2)}$ an den beiden Detektoren

$$\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 \langle S^{(1)} S^{(2)} \rangle = P_{++} + P_{--} - P_{+-} - P_{-+} = -\cos \vartheta. \quad (6.16)$$

Für $\vartheta = 0$ ergibt sich erwartungsgemäß eine perfekte Antikorrelation, für $\vartheta = \pi$ perfekte Korrelation. Wir können nun die Erwartungswerte der verschiedenen Beiträge zu C für unsere spezielle Wahl der Detektororientierungen berechnen:

$$\langle Z_1 Z_2 \rangle = -\cos(0) = -1, \quad \langle Z_1 N_2 \rangle = \langle N_1 Z_2 \rangle = -\cos \theta, \quad \langle N_1 N_2 \rangle = -\cos 2\theta,$$

und damit

$$\langle C \rangle = -1 - 2 \cos \theta + \cos 2\theta = -2 - 2 \cos \theta (1 - \cos \theta), \quad (6.17)$$

[†] Diese Form geht zurück auf Clauser, Horne, Shimony und Holt, *Proposed Experiment to Test Local Hidden-Variable Theories*, Physical Review Letters **23** 880 (1969).

wobei im letzten Schritt die Identität $\cos 2\theta = 2 \cos^2 \theta - 1$ benutzt wurde. Wir sehen also, daß die Bell'sche Ungleichung (6.13) für $0 < \theta < \frac{\pi}{2}$ verletzt ist. Die quantenmechanisch vorhergesagten (und in zahlreichen Experimenten nachgewiesenen) Korrelationen sind mit den lokal-realistischen Annahmen (i) und (ii) nicht verträglich.

Welche der beiden Annahmen man aufgeben sollte ist eine weitgehend philosophische Frage. Die Anhänger von Theorien mit verborgenen Variablen halten an der Realitätsannahme (ii) fest und müssen (wie Bell gezeigt hat) die Forderung nach Lokalität aufgeben. So hat z.B. David Bohm eine objektiv-realistische Formulierung der Quantenmechanik formuliert, die manifest nichtlokal ist[‡]. Viele Physiker sind eher geneigt, Annahme (ii) aufzugeben und (mit den Worten von Asher Peres) auf die objektive Existenz von Ergebnissen nicht-ausgeführter Experimente zu verzichten.

7. Relativistische Wellengleichungen

Bei der Motivation der Schrödinger-Gleichung in Kap. 2 sind wir ausgegangen von der nichtrelativistischen Energie-Impuls-Beziehung (1.10). Die Schrödinger-Gleichung gilt deshalb nur im nichtrelativistischen Grenzfall, und liefert z.B. bei Atomen mit hoher Kernladungszahl (und entsprechend hohen Geschwindigkeiten der Elektronen) keine gute Beschreibung mehr.

In diesem Kapitel werden wir zwei relativistische Wellengleichungen für freie Teilchen kennenlernen. Um sie zu konstruieren, gehen wir aus von der relativistischen Energie-Impuls-Beziehung (1.9) in Kombination mit den quantenmechanischen Ersetzungsregeln (2.4). Dabei tritt die Schwierigkeit auf, daß auf der rechten Seite von (1.9) eine Wurzel steht. Nach Anwendung von (2.4) müssen wir also gewissermassen die Wurzel des Operators $-\hbar^2 \nabla^2 + m^2 c^2$ ziehen. Es ist nicht offensichtlich, daß dies in einer mathematisch sinnvollen Weise möglich ist.

7.1. Klein-Gordon-Gleichung

Wir vermeiden zunächst das Problem des Wurzelziehens, indem wir beide Seiten von (1.9) quadrieren und danach die Ersetzungsregeln anwenden. Dies führt auf die *Klein-Gordon-Gleichung*

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \psi = - \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \psi. \quad (7.1)$$

Der Operator auf der linken Seite ist der aus der Elektrodynamik bekannte d'Alembert-Operator, und für $m = 0$ reduziert sich (7.1) auf die elektromagnetische Wellengleichung (1.22).

Wir hatten in Abschnitt 2.2 gesehen, daß eine konsistente Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Wellenfunktion die Gültigkeit der Kontinuitätsgleichung (2.17) für die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ_ψ und den Wahrscheinlichkeitstrom \vec{J}_ψ erfordert. Aus der

[‡] Detlef Dürr, *Bohmsche Mechanik als Grundlage der Quantenmechanik* (Springer, 2001).

Klein-Gordon-Gleichung (7.1) läßt sich ebenfalls eine Kontinuitätsgleichung der Form (2.17) mit dem Strom (2.16) herleiten, die entsprechende Dichte ist aber von der Form

$$\rho_\psi = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right). \quad (7.2)$$

Diese Größe ist nicht notwendig positiv, und läßt sich deshalb nicht als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretieren (tatsächlich verschwindet sie identisch für zeitunabhängige Zustände). Der Vergleich von (2.16) und (7.2) zeigt die von der Relativitätstheorie geforderte Symmetrie zwischen Raum und Zeit.

7.2. Dirac-Gleichung

Paul Dirac stellte sich 1928 die Aufgabe, eine relativistische Wellengleichung herzuleiten, die eine konsistente Wahrscheinlichkeitsinterpretation erlaubt. Er ging aus von den folgenden Forderungen:

- (i) Die Wellengleichung sollte eine Differentialgleichung erster Ordnung in der Zeit sein, also

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}_D \psi \quad (7.3)$$

mit dem Dirac-Operator \hat{H}_D . Damit ist garantiert, daß eine positive Wahrscheinlichkeitsdichte existiert.

- (ii) Wegen der Symmetrie zwischen Raum und Zeit in der Relativitätstheorie kann eine solche Wellengleichung auch nur erste Ableitung nach den Ortskoordinaten enthalten. Das bedeutet, daß der Hamilton-Operator in (7.3) *linear* in den Impulskomponenten sein muß, also

$$\hat{H}_D = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}_{\text{op}} + \beta mc^2. \quad (7.4)$$

Dabei sind die Koeffizienten der beiden Terme so gewählt, daß die (noch zu bestimmenden) 4 Größen $\vec{\alpha} = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z)$ und β dimensionslos sind.

- (iii) Die relativistische Energie-Impuls-Beziehung (1.9) soll in quadrierter Form erfüllt sein, d.h. es muß gelten

$$\hat{H}_D^2 = \hat{H}_D \circ \hat{H}_D = c(\vec{p}_{\text{op}})^2 + m^2 c^4 = c(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + m^2 c^4. \quad (7.5)$$

Wir setzen den Ansatz (7.4) in die Bedingung (7.5) ein. Da die verschiedenen Impulskomponenten miteinander kommutieren, können wir sie als Zahlen behandeln, $\hat{p}_{x,y,z} \rightarrow p_{x,y,z}$, bei den Größen $\alpha_{x,y,z}$ und β achten wir aber auf die Reihenfolge der Multiplikationen:

$$\begin{aligned} \hat{H}_D^2 &= c^2(\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z)(\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z) + \\ &+ mc^3(\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z)\beta + mc^3\beta(\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z) + \beta^2 m^2 c^4 = \\ &= c^2(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + m^2 c^4. \end{aligned}$$

Auf der linken Seite müssen sich alle linearen ($\sim p_{x,y,z}$) und gemischten ($\sim p_x p_y, p_x p_z, p_y p_z$) Terme wegheben, und zwar für *beliebige* Impulskomponenten $p_{x,y,z}$. Die gemischten Terme treten auf in Kombinationen wie $(\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x) p_x p_y$, die linearen Terme in der Form $(\beta \alpha_{x,y,z} + \alpha_{x,y,z} \beta) p_{x,y,z}$. Die Bedingung (7.5) kann somit nur erfüllt werden, wenn die vier Größen $\alpha_{x,y,z}, \beta$ untereinander *antikommutieren*, d.h.

$$\alpha_x \alpha_y + \alpha_y \alpha_x = [\alpha_x, \alpha_y]_+ = [\alpha_x, \alpha_z]_+ = [\alpha_y, \alpha_z]_+ = [\alpha_{x,y,z}, \beta]_+ = 0. \quad (7.6)$$

Außerdem muß gelten

$$\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = 1. \quad (7.7)$$

Die Beziehungen (7.6) können von reellen oder komplexen Zahlen offensichtlich nicht erfüllt werden, wohl aber von Matrizen. Die einfachste Realisierung der *Algebra* (7.6,7.7) bilden vierdimensionale Matrizen der Form

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1}_{2 \times 2} \end{pmatrix}, \quad i = x, y, z, \quad (7.8)$$

wobei die σ_i die *Pauli-Matrizen*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

bezeichnen und

$$\mathbf{1}_{2 \times 2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

die zweidimensionale Einheitsmatrix. Man überzeugt sich leicht davon, daß die Matrizen (7.8) die Bedingungen (7.6,7.7) tatsächlich erfüllen.

Wir schliessen daraus, daß die Wellenfunktion ψ in der Dirac-Gleichung (7.3) ein (mindestens) vierkomponentiger Vektor

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

sein muß, und es stellt sich die Frage nach der physikalischen Bedeutung der vier Komponenten.

7.2.1. Spin. Ein erster Hinweis ergibt sich aus der Tatsache, daß die Pauli-Matrizen (7.9) in (7.8) auftauchen. Wie schon in Abschnitt 5.2.2 erwähnt wurde, ist der Bahndrehimpuls keine Erhaltungsgröße der Dirac-Gleichung. Es gilt $[\vec{L}_{\text{op}}, \hat{H}_D] \neq 0$, aber $[\vec{L}_{\text{op}} + \vec{S}_{\text{op}}, \hat{H}_D] = 0$, wobei der Spin-Operator

$$\vec{S}_{\text{op}} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad (7.11)$$

proportional zum Vektor $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ der Pauli-Matrizen ist. Man überprüft leicht, daß die Spinkomponenten $\hat{S}_{x,y,z}$ die charakteristischen Vertauschungsrelationen (5.2)

von Drehimpulsoperatoren erfüllen. Die Dirac-Gleichung *sagt die Existenz des Spins voraus*, und je zwei Komponenten der Wellenfunktion (7.10) beschreiben die beiden Einstellmöglichkeiten des Spins.

7.2.2. Antiteilchen. Die zweite Verdoppelung der Zahl der Komponenten in (7.10) spiegelt die Existenz von Lösungen mit *negativer Energie* $E = -c\sqrt{|\vec{p}|^2 + m^2c^2}$ wider. Diese Lösungen hat man sich gewissermaßen eingehandelt, indem (1.9) quadriert wurde, um die Bedingung (7.5) zu bekommen. In der Anfangsphase stellten diese Lösungen ein ernsthaftes Problem der Dirac'schen Theorie dar, da man erwarten mußte, daß Elektronen unter Abgabe von Strahlung in Zustände beliebig stark negativer Energie übergehen könnten. Zwei Jahre nach der Publikation seiner Gleichung präsentierte Dirac einen äußerst kreativen Ausweg aus diesem Dilemma, den wir hier in der Originalformulierung[†] wiedergeben:

”The most stable states for an electron (i.e., the states of lowest energy) are those with negative energy and very high velocity. All the electrons in the world will tend to fall into these states with emission of radiation. The Pauli exclusion principle, however, will come into play and prevent more than one electron going into any one state. Let us assume there are so many electrons in the world that all the most stable states are occupied, or, more accurately, that *all the states of negative energy are occupied except perhaps a few of small velocity*. Any electrons with positive energy will now have very little chance of jumping into negative-energy states and will therefore behave like electrons are observed to behave in the laboratory. We shall have an infinite number of electrons in negative-energy states, and indeed an infinite number per unit volume all over the world, but if their distribution is exactly uniform we should expect them to be completely unobservable. *Only the small departures from exact uniformity, brought about by some of the negative-energy states being unoccupied, can we hope to observe.*”

Im weiteren Verlauf des Artikels argumentiert Dirac, daß sich ein Loch im See der gefüllten Zustände negativer Energie wie ein positiv geladenes Teilchen verhalten sollte, und schlägt vor, daß es sich dabei um das Proton handeln könnte. Zwei Jahre später zeigte die Entdeckung des Positrons[‡], daß Dirac tatsächlich die Existenz von *Antiteilchen* vorhergesagt hatte.

[†] P.A.M. Dirac, *A theory of electrons and protons*, Proc. Roy. Soc. London A **126**, 360 (1930).

[‡] Carl D. Anderson, *The positive electron*, Physical Review **43**, 491 (1933). Anderson erhielt für diese Entdeckung 1936 den Nobelpreis für Physik.