

1 Welle-Teilchen-Dualismus

1.1 Klassische Physik um 1900

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 Relativitätstheorie¹ durch Modifikation der klassischen Kinematik und Dynamik. Damit findet die Lichtgeschwindigkeit c als Grenzgeschwindigkeit Eingang in die Mechanik massiver Körper. 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. 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.

¹A. Einstein, *Zur Elektrodynamik der bewegten Körper* (1905).

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 war², besteht nun darin, dass die konsequente Anwendung der Boltzmannschen statistischen Mechanik³ auf das klassische elektromagnetische Feld notgedrungen auf das Rayleigh-Jeans-Gesetz

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

führt⁴. 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

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

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

²Zur historischen Entwicklung s. T.S. Kuhn, *Black-Body Theory and the Quantum Discontinuity, 1894-1912* (University of Chicago Press, 1987).

³Diese werden wir im zweiten Teil der Vorlesung kennenlernen; s. dazu Abschnitt 5.4 des Thermodynamik-Skripts.

⁴ $k_B = 1.3803 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ ist die Boltzmann-Konstante.

einen expliziten Ausdruck für die Konstante σ im Stefan-Boltzmann-Gesetz (1.2). Das Maximum der Energiedichte liegt bei einer Frequenz $\omega_{\max}$, 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 Einstein⁵ 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.

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,

⁵A. Einstein, *Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt* (1905).

diesen hypothetischen Teilchen neben der Energie (1.7) auch einen Impuls zuzuordnen. Ausgangspunkt ist die Energie-Impuls-Beziehung für relativistische Teilchen,

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

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 herleiten⁶. 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

⁶W. Heisenberg, *Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie* (1930).

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} mindestens⁷

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

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-Energie⁸ 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 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

⁷Hier wurde die Unschärferelation in der Form $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ benutzt.

⁸Im cgs-System.

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 Einfallsrichtung 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*⁹. 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 1999¹⁰)

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:

⁹Z.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).

¹⁰S. dazu den Artikel von Markus Arndt und Olaf Nairz unter <http://pluslucis.univie.ac.at/PlusLucis/993/index.html> oder auf der Vorlesungs-Homepage.

- (i) Die Welleneigenschaften werden beschrieben durch die Wellengleichung¹¹

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

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-Beziehung¹² $E = E_{\text{kin}} = |\vec{p}|^2/2m$. 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:

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

¹¹ $\nabla^2 = \Delta = \text{div} \cdot \text{grad}$.

¹² Vgl. mit (1.10); wir verschieben hier den Energie-Nullpunkt so, dass die Ruhenenergie 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 umwandeln, 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 $d^3\vec{r}$ um den Punkt $\vec{r}$ zur Zeit t anzutreffen ist $|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$, und die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in einem endlichen Volumen Ω anzutreffen ist

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

ψ heisst entsprechend auch *Wahrscheinlichkeitsamplitude*.

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

- (i) 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:

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

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*.

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

$$\frac{d}{dt} \int d^3\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \int d^3\vec{r} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \psi^* + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \right) = 0. \quad (2.8)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*] = -\nabla \cdot \vec{J}_\psi, \quad (2.9)$$

wobei der *Wahrscheinlichkeitsstrom* $\vec{J}_\psi$ definiert ist durch

$$\vec{J}_\psi = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{\hbar}{m} \Im[\psi^* \nabla \psi]. \quad (2.10)$$

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*,

$$\frac{\partial \rho_\psi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_\psi = 0. \quad (2.11)$$

Wie jede Grösse, die einer Kontinuitätsgleichung genügt (z.B. die elektrische Ladungsdichte oder die Massendichte einer Flüssigkeit) ist ρ_ψ *lokal erhalten*: Integration von (2.11) über ein beliebiges Teilvolumen Ω liefert nach Anwendung des Gauss'schen Satzes

$$\frac{d}{dt} \int_\Omega d^3\vec{r} |\psi(\vec{r}, t)|^2 = - \int_\Omega d^3\vec{r} \nabla \cdot \vec{J}_\psi = \int_{\partial\Omega} d^2\vec{f} \cdot \vec{J}_\psi, \quad (2.12)$$

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 (2.12) den gesamten verfügbaren Raum, so verschwindet das Oberflächeintegral und (2.8) ist erfüllt.

2.3 Wellenpakete

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

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{i[\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k})t]} \quad (2.13)$$

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

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3\vec{r} A(\vec{k}) e^{i[\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t]}. \quad (2.14)$$