

Quantenmechanik

Rainer Hauser

Juli 2015

1 Einleitung

1.1 Teilchencharakter des Lichts und Wellencharakter der Materie

In der ersten Hälfte des 19. Jahrhunderts schien sich im Disput, ob Licht gemäss Newton aus Teilchen oder gemäss Huygens aus Wellen besteht, die Wellennatur endgültig durchgesetzt zu haben. Als Maxwell 1855 die elektrodynamischen Grundgleichungen aufstellte, aus denen die elektromagnetischen Wellen folgen, stellte sich das sichtbare Licht als eine Form von elektromagnetischen Wellen heraus, und die Frage war nur, was der Träger dieser Wellen ist. Der dafür postulierte Äther liess sich nicht nachweisen, was 1905 schliesslich zur Speziellen Relativitätstheorie von Einstein führte.

Zur Erklärung des photoelektrischen Effekts führte Einstein im selben Jahr, aber unabhängig davon die *Photonen* als masselose Teilchen mit der Energie E und dem Impuls \mathbf{p} (als Vektor fettgedruckt)

$$E = |\mathbf{p}|c = h\nu = \hbar\omega \qquad |\mathbf{p}| = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \qquad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \qquad (1)$$

ein, wobei ν die Frequenz, λ die Wellenlänge, $c = \lambda\nu$ die Lichtgeschwindigkeit und $h = 2\pi\hbar$ das Plancksche Wirkungsquantum ist. Weil elektromagnetische Wellen also sowohl Wellen- als auch Teilchencharakter haben, spricht man vom *Welle-Teilchen-Dualismus*.

Wenn Licht auch Teilchencharakter hat, so hat Materie vielleicht auch Wellencharakter. Ausgehend von dieser These und den Gleichungen (1) für das Photon entwickelte de Broglie eine Theorie der Materiewellen, und Schrödinger baute sie aus, ohne aber zu wissen, wie man die Wellenfunktion physikalisch interpretieren soll. Beugungsexperimente haben später den Wellencharakter unter anderem von Elektronen nachgewiesen. Je mehr Teilchen beteiligt sind, desto deutlicher sind die Interferenzmuster.

1.2 Ältere Quantentheorie

Die zeitliche Änderung einer Quantensystems beziehungsweise einer gequantelten Grösse lässt sich nicht mehr mit rein klassischen Begriffen beschreiben. So macht es beispielsweise keinen Sinn mehr, von der Umlaufbahn eines Elektrons um den Atomkern zu sprechen, weil man dem Elektron nicht mehr wie in der klassischen Mechanik genau einen Ort zu jedem Zeitpunkt zuordnen kann.

Der grosse Erfolg der klassischen Physik bedingt, dass die Quantentheorie für den Grenzfall grosser Quantenzahlen asymptotisch in die klassische Theorie übergehen muss. Deshalb kann man erwarten, dass zwischen der Quantentheorie und der klassischen Theorie eine formale Analogie besteht. Diese als *Korrespondenzprinzip* bezeichnete Forderung stammt von Bohr und leitete anfänglich die intuitive Kunst der Quantisierung. Das Aufstellen von Quantisierungsregeln war das zentrale Problem der so genannten älteren Quantentheorie, die aber keine aperiodischen Bewegungen behandeln konnte.

Die kritische Auseinandersetzung mit dieser noch unausgereiften Theorie führte fast gleichzeitig zu zwei bis heute akzeptierten Formulierungen der eigentlichen Quantenmechanik. Ausgehend von der Beobachtbarkeit in der Physik entwickelte Heisenberg die *Matrizenmechanik*, während Schrödinger ausgehend von de Broglies Materiewellen die *Wellenmechanik* aufstellte. Obwohl die beiden Formulierungen sehr verschieden aussehen, haben sie sich als äquivalent herausgestellt.

1.3 Operatoren

Ist $\Psi(\mathbf{r}, t)$ eine Funktion, so ist auch ihre partielle Ableitung nach der Zeit eine Funktion. Das ist ein Beispiel eines Operators, denn ein *Operator* A ordnet jeder Funktion Ψ in einem gewissen Funktionenraum eine Funktion $\Psi' = A\Psi$ zu. Neben partiellen Ableitungen ist auch die Multiplikation mit einer Funktion $f(\mathbf{r}, t)$ ein Operator. Gilt weiter für beliebige Zahlen λ_1 und λ_2 und beliebige Funktionen Ψ_1 und Ψ_2 aus dem gegebenen Funktionenraum $A(\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2) = \lambda_1(A\Psi_1) + \lambda_2(A\Psi_2)$, so ist A ein *linearer Operator*.

Sind A und B zwei Operatoren, so ist auch das Produkt AB definiert durch $(AB)\Psi = A(B\Psi)$ ein Operator. Weil für das Produkt nicht immer $AB = BA$ gilt, das Produkt also nicht immer kommutativ ist, definiert man den *Kommutator* als Operator $[A, B] = AB - BA$. Ist $[A, B] = 0$, so kommutieren die Operatoren A und B .

Die Operatoren Gradient ∇ , Laplace-Operator Δ und d'Alembert-Operator \square definiert durch

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \square = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \quad (2)$$

sind in der Physik wichtig. Man schreibt manchmal auch $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ als ein Skalarprodukt.

2 Beschreibung bedeutender experimenteller Befunde

2.1 Schwarzkörperstrahlung

Ein weisser Körper reflektiert bekanntlich Licht, während ein schwarzer Körper Licht absorbiert. Ein perfekt schwarzer Körper, der die gesamte elektromagnetische Strahlung absorbiert und gar nichts davon reflektiert, erwärmt sich durch diese Absorption und emittiert somit selber elektromagnetische Strahlung, dessen Spektrum nur von seiner Temperatur abhängt.

Perfekt schwarze Körper gibt es zwar nicht, aber eine hohle Metallkugel, in die man durch ein kleines Loch elektromagnetische Strahlung einführt, die im Hohlraum so lange reflektiert wird, bis sie ganz absorbiert worden ist, verhält sich wie ein perfekt schwarzer Körper. Damit kann man die emittierte Spektralverteilung experimentell bestimmen und mit der theoretischen Verteilung durch das Rayleigh-Jeans-Gesetz der klassischen Physik vergleichen. Die Theorie zeigt, dass jeder Körper, der eine Temperatur über dem absoluten Nullpunkt hat, unendlich viel Energie als elektromagnetische Strahlung emittieren müsste, was weder mit dem experimentellen Befund übereinstimmt, noch sonst viel Sinn macht.

Max Planck beschäftigte sich mit diesem als *Ultraviolettkatastrophe* bezeichneten Problem und fand mittels eines Kunstgriffs, der ihm selber nicht geheuer war, eine Lösung, indem er Emission und Absorption von elektromagnetischer Strahlung nur in Quanten zuließ. So ein Quantum als kleinste Energieeinheit wurde später als *Plancksches Wirkungsquantum* h bezeichnet.

2.2 Photoelektrischer Effekt

Bestrahlt man eine Metallplatte mit Licht, können Elektronen aus dieser Metallplatte entweichen. Dieses als *photoelektrischer Effekt* bezeichnete Phänomen liess sich jedoch theoretisch nicht befriedigend erklären. Variiert man einerseits die Intensität der Strahlung und andererseits ihre Frequenz, so würde man nach der Wellentheorie des Lichts erwarten, dass der gemessene Stromfluss durch die herausgeschlagenen Elektronen bei Abnahme der Frequenz zwar kleiner wird, aber nie ganz aufhört, und dass die Geschwindigkeit der Elektronen von der Intensität abhängt. Es zeigt sich jedoch, dass es eine Grenzfrequenz gibt, unterhalb derer keine Elektronen herausgeschlagen werden, und dass die Erhöhung der Intensität mehr Elektronen ausschlägt, aber nicht zu einer höheren Emissionsgeschwindigkeit führt.

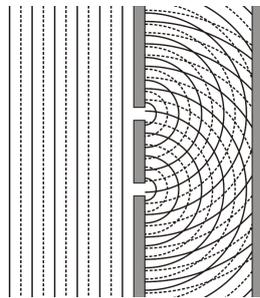
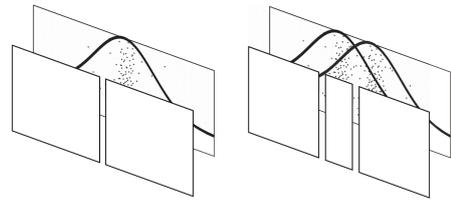
In einer seiner berühmten drei Arbeiten aus dem Jahr 1905 löste Einstein das Problem, indem er wie oben erwähnt Licht als Teilchen und nicht als Welle interpretierte. Besteht Licht aus Photonen, also aus kleinen Kügelchen, deren Energie gemäss (1) proportional zur Frequenz λ ist, so wird verständlich, dass Photonen mit Frequenz unterhalb der Grenzfrequenz zu wenig Energie besitzen, um Elektronen, also andere Kügelchen, die durch Kräfte in ihrer Umgebung gehalten werden, aus der Metallplatte zu

schlagen, und dass eine Erhöhung der Intensität nur die Zahl, nicht aber die Austrittsgeschwindigkeit der Elektronen beeinflusst. Mit dieser Arbeit hat Einstein mitgeholfen, die Quantenmechanik zu entwickeln, obwohl er sie später bis an sein Lebensende vehement bekämpft hat.

2.3 Doppelspaltexperimente

Das wohl bekannteste Experiment, das im Zusammenhang mit der Begründung der Quantenmechanik steht, ist das so genannte Doppelspaltexperiment, das auf Thomas Young und die ersten Jahre des neunzehnten Jahrhunderts zurückgeht. In der Diskussion um das richtige Modell für Licht glaubte er, den entscheidenden Beweis geliefert zu haben, dass Licht nicht aus Teilchen besteht, sondern als Welle modelliert werden muss. In der Zwischenzeit lässt sich das Experiment mit analogem Resultat auch mit Elektronen – ja sogar ganzen Atomen und Molekülen – durchführen.

Schiesst man mit Bällen, die Flecken hinterlassen, auf eine Fläche, so markieren die Bälle darauf den getroffenen Ort. Stellt man vor die Fläche einen Schirm, der die Bälle wie links in der nebenstehenden Abbildung zeigt nur durch einen Spalt durchlässt, so befinden sich die Flecken durch die Bälle auf einem schmalen Streifen hinter dem Spalt konzentriert. Die meisten Flecken befinden sich vom Ort, von dem aus die Bälle geworfen werden, in gerader Linie durch den Spalt. Ein paar Bälle werden am Spalt abgelenkt. Hat der Schirm noch einen zweiten Spalt wie rechts in der Abbildung gezeigt, so entstehen eben zwei Streifen, ohne dass etwas Unerwartetes passiert. Die Glockenkurve links und die beiden Glockenkurven rechts veranschaulichen ungefähr die Häufigkeitsverteilung der Flecken auf dem Schirm. Will man von jedem Fleck auf der Fläche hinter dem Schirm wissen, von welchem Ball er verursacht wurde, und durch welchen Spalt der Ball geflogen ist, kann man eine Filmkamera aufstellen, was das Experiment in keiner Weise beeinflusst.



In atomarer Grössenordnung mit Photonen, Elektronen oder anderen Teilchen statt Bällen passiert zwar bei einem einzigen Spalt dasselbe, wie man erwarten würde, wenn sich die Teilchen wie Bälle verhielten, nicht aber beim Doppelspalt. Die nebenstehende Abbildung zeigt das Verhalten einer ebenen Welle, die auf einen Doppelspalt trifft. Bei jedem Spalt entsteht eine Kugelwelle. Gibt es nur einen Spalt, so dehnt sich die Kugelwelle ungestört aus. Gibt es aber mehrere, so stören sich die Kugelwellen gegenseitig. Die Überlagerung der verschiedenen Kugelwellen nennt man *Interferenz*.

Am einfachsten lässt sich das Doppelspaltexperiment mit Hilfe von Wasserwellen vorstellen. Treffen ebene Wellen auf eine Wand, in der zwei Löcher sind, so entsteht bei jedem Loch eine Welle, die sich kreisförmig ausdehnt. Jedes der beiden Löcher ist also Ausgangspunkt von kreisrunden Wellen. Treffen je zwei Wellenberge oder je zwei Wellentäler von den beiden Löchern aufeinander, so verstärken sie sich. Trifft hingegen ein Wellenberg vom einen Loch auf ein Wellental vom anderen, so heben sie sich auf. Während bei einem einzelnen Spalt einfache Kugelwellen entstehen, die sich ringförmig ausdehnen, entstehen bei einem Doppelspalt kompliziertere Interferenzmuster. In der Abbildung sind Wellenberge durch ausgezogene Linien und Wellentäler durch gestrichelte Linien dargestellt. Je nach der Stelle auf dem grauen Balken rechts ist der Wasserstand zu einem bestimmten Zeitpunkt also verschieden hoch.

Solche Interferenzen entstehen auch bezüglich Häufigkeit der Einschläge, wenn man Photonen oder Elektronen durch einen Doppelspalt schiesst. Es ist also, als würde sich ein Photon oder Elektron teils durch den einen Spalt und teils durch den anderen Spalt bewegen, was Bälle in unserer makroskopischen Welt niemals tun. Versucht man mit einer Apparatur für jedes Teilchen zu bestimmen, durch welchen Spalt es geht, verschwinden die Interferenzmuster. Ein Ball wird dadurch, dass er durch eine Kamera gefilmt wird, in seiner Flugbahn nicht spürbar beeinflusst. Teilchen in der atomaren Grössenordnung können aber nur durch Interaktion mit Teilchen ähnlicher Grösse wie beispielsweise Photonen beobachtet werden, was ihr Bewegungsverhalten verändert. Wenn wir statt mit unseren Augen oder mit einer Filmkamera mit unseren Händen abtasten müssten, durch welchen Spalt ein Ball fliegt, und welchen Fleck er hinterlässt, würden wir dadurch auch das Bewegungsverhalten der Bälle spürbar beeinflussen.

3 Materiewellen und Schrödinger-Gleichung

3.1 Wellen und Wellenpakete

Eine eindimensionale, harmonische Welle mit Wellenlänge λ und Frequenz ν wird durch die Funktion $\varphi(x, t) = A \sin(kx - \omega t)$ beschrieben, wobei für die vorkommenden Größen $\omega = kv = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T}$, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ und $v = \nu\lambda$ gilt. Die Welle schwingt mit der Periode T , und die Wellenberge bewegen sich mit der Geschwindigkeit v . In der Wellenmechanik benutzt man komplexe Zahlen, sodass die Sinusfunktion durch $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$ ersetzt wird. Jede Welle kann als Überlagerung von ebenen, monochromatischen Wellen $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega\cdot t)}$ dargestellt werden.

Ein eindimensionales beziehungsweise dreidimensionales *Wellenpaket*

$$\Psi(x, t) = \int_{\mathbb{R}} f(k) e^{i(k\cdot x - \omega(k)\cdot t)} dk \qquad \Psi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{R}^3} f(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega\cdot t)} d\mathbf{k} \quad (3)$$

mit $\omega = \omega(|\mathbf{k}|)$ beschreibt in der Wellenmechanik ein Teilchen. Von solchen Wellenpaketen kann man erwarten, dass sie von begrenzter Ausdehnung sind.

Die Frage ist, wie man diese Wellenfunktion interpretiert. Selbst bei Abwesenheit eines äusseren Feldes kann ein Wellenpaket seine Teilchengestalt nicht beliebig lange behalten, denn es zerfließt im Laufe seiner Bewegung und füllt schliesslich nach einer genügend langen Zeit einen beliebig grossen Raum aus.

3.2 Interpretation der Wellenfunktion

Bei klassischen Wellen wie Schallwellen ist die Energie pro Volumeneinheit in der Welle proportional zum Quadrat der Wellenfunktion. Das Quadrat der Wellenfunktion des Photons muss also in einer Lichtwelle proportional zur Anzahl der Photonen pro Volumeneinheit sein. Hat eine Lichtquelle sehr geringe Leistung, befindet sich in jeder Volumeneinheit maximal ein Photon, sodass das Quadrat der Wellenfunktion der *Wahrscheinlichkeit* entspricht, in einer Volumeneinheit ein Photon zu finden.

Somit beschreibt das Quadrat der Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$ die *Wahrscheinlichkeitsdichte*. Weil sich viele interessante Fälle wie etwa das gebundene Elektron in einem Wasserstoffatom durch eine stehende Welle beschreiben lässt, und weil sich stehende Wellen durch eine Wellenfunktion der Form $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot e^{-i\omega t}$ darstellen lassen, gilt für die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(x)$ und die Normierungsbedingung

$$P(x) = |\psi(x)|^2 \qquad \int_{-\infty}^{\infty} P(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (4)$$

in diesem hier auf eindimensionale Wellenfunktionen beschränkten Fall.

Schreibt man Ψ^* für die konjugiert komplexe Funktion zu Ψ , so ist im allgemeinen, dreidimensionalen Fall für die Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t)$

$$P(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = \Psi(\mathbf{r}, t) \Psi^*(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (5)$$

die Wahrscheinlichkeit, das durch die Wellenfunktion beschriebene Teilchen in der Volumeneinheit $d\mathbf{r}$ zu finden. Integriert man die Wahrscheinlichkeitsdichte über den ganzen dreidimensionalen Raum muss analog zur Normierungsbedingung in (4) für jeden Zeitpunkt t der Wert 1 herauskommen.

3.3 Kollaps der Wellenfunktion

Wenn man einen lichtempfindlichen Film mit Photonen beschiesst, so markiert jedes Photon auf dem Film einen klar definierten Ort. Die Wellenfunktion mit ihrer Ausdehnung ist somit zu einem einzelnen Punkt zusammengeschrumpft. Dasselbe passiert auch, wenn man eine Folie mit Elektronen, Protonen oder anderen Teilchen beschiesst, falls man anschliessend die Einschussorte feststellen kann.

Ein Teilchen wird durch eine Wellenfunktion beschrieben, die wie oben gezeigt mit der Zeit auseinander fließt. Ein solches Teilchen wie etwa ein Elektron ist zwar kein Kügelchen im makroskopischen Sinn,

aber es nimmt doch endlich viel Platz ein und hat einen Radius, den man messen kann. Bestimmt man also durch eine Messung den Ort dieses Elektrons, so beschreibt nicht mehr die ursprüngliche Wellenfunktion das Elektron, sondern es entsteht an diesem Ort eine neue Wellenfunktion. Man sagt, dass die ursprüngliche Wellenfunktion durch die Messung kollabiert.

3.4 Schrödinger-Gleichung

Die Schrödinger-Gleichung lässt sich wie viele Formeln in der Physik nicht herleiten. Man kann sie aber intuitiv geführt erraten. Für die Wellengleichung eines freien Teilchens gilt

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \int f(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E\cdot t)/\hbar} d\mathbf{p} & i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \int E f(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E\cdot t)/\hbar} d\mathbf{p} \\ \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) &= \int \mathbf{p} f(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E\cdot t)/\hbar} d\mathbf{p} & -\hbar^2 \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) &= \int |\mathbf{p}|^2 f(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}-E\cdot t)/\hbar} d\mathbf{p} \end{aligned}$$

mit (1) und (3), woraus mit der Beziehung $2mE = p^2 = |\mathbf{p}|^2$ zwischen dem Impuls \mathbf{p} und der Energie E unmittelbar die *zeitabhängige Schrödinger-Gleichung*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) \qquad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - E_{pot}\right) \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

für ein freies Teilchen links und etwas weniger offensichtlich für ein Teilchen mit der potenziellen Energie E_{pot} rechts abgelesen werden kann. Im Fall eines freien Teilchens gelten somit die Entsprechungen

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \qquad \mathbf{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (7)$$

zwischen Größen in der klassischen Physik und Operatoren in der Quantenmechanik. Für die spezielle Wellenfunktion $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}$ folgt aus (6) die *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung*

$$E\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - E_{pot}\right) \psi(\mathbf{r}) \quad (8)$$

eines Teilchens mit der potenziellen Energie E_{pot} . Dafür kann man auch $H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$ schreiben, wobei H der Hamilton-Operator ist. Das ist eine Eigenwertgleichung, und die Lösung $\psi_E(\mathbf{r})$ heisst *Eigenfunktion zum Eigenwert E* .

3.5 Heisenberg'sche Unschärferelation

Will man die Position eines Objekts mit Hilfe von Licht der Wellenlänge λ bestimmen, so wird das Licht am Objekt gestreut, und man bestimmt die Position des Objekts anhand der Richtung des gestreuten Lichts. Wegen Beugungseffekten kann man die Position x nur mit einer Unsicherheit von Δx messen, wobei $\Delta x \approx \lambda$ gilt. Um die Genauigkeit zu vergrössern, kann man beispielsweise Röntgenstrahlen mit kleiner Wellenlänge wählen.

Um den Impuls zu bestimmen, muss man die Masse und die Geschwindigkeit kennen. Die Geschwindigkeit kann man durch zwei Ortsmessungen kurz hintereinander ermitteln. Benutzt man dazu Licht der Wellenlänge λ , so ändert sich der Impuls p des Objekts mit jedem Photon um h/λ , sodass für die Unsicherheit Δp entsprechend $\Delta p \approx h/\lambda$ gilt.

Um das Produkt $\Delta x \cdot \Delta p$ möglichst klein zu halten, nützt es nichts, wenn man die Wellenlänge des gewählten Lichts verändert. Es nützt aber auch nichts, wenn man die Intensität des Lichts verkleinert, weil man mindestens ein Photon braucht, um den Ort zu bestimmen. Die obigen Überlegungen bedeuten $\Delta x \cdot \Delta p \approx h$. Die *Heisenberg'sche Unschärferelation* besagt präziser formuliert

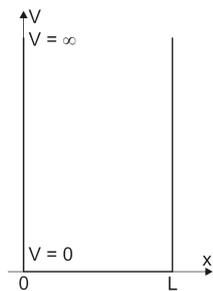
$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (9)$$

für die Standardabweichung Δx und Δp bei der Messung der Position und des Impulses. Diese Ungleichung folgt aus dem Welle-Teilchen-Dualismus und gilt somit prinzipiell.

Zwei interessante Schlüsse kann man aus der Heisenberg'schen Unschärferelation (9) ziehen. Einerseits darf ein Teilchen nie ganz in Ruhe sein, denn damit wäre sein Impuls p exakt null, sodass Δx unendlich gross werden müsste. Andererseits lässt sich die Dispersion eines Wellenpaketes, also die Tatsache, dass ein Wellenpaket (3) im Laufe seiner Bewegung zerfließt und immer mehr Raum einnimmt, dadurch erklären, dass durch die anfängliche Ungenauigkeit des Impulses (also der Richtung und der Stärke der Geschwindigkeit) auch der zukünftige Ort immer ungenauer werden muss.

4 Berechenbare Beispiele

4.1 Unendlich hoher Potentialtopf



Ein Teilchen befinde sich in einem unendlich grossen Potentialtopf der Breite L wie in der nebenstehenden Abbildung gezeigt. Im Intervall $0 \leq x \leq L$ ist das Potential $V = 0$ und ausserhalb gilt $V = \infty$, sodass die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zwischen 0 und L zu finden, gleich eins, und ausserhalb gleich 0 ist. Weil das Potential zeitlich konstant ist, und weil das Teilchen selber keine potentielle Energie hat, kann man die Gleichung (8) in der Form

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(x)$$

schreiben, wobei die vektorielle Grösse \mathbf{r} durch die eindimensionale Variable x ersetzt worden ist und der Laplace-Operator zur gewöhnlichen zweiten Ableitung wird.

Somit gilt es, die Differentialgleichung

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = k^2\psi(x)$$

mit $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ zu lösen. Die allgemeine Lösung ist (wieder wie oben mit $e^{ix} = \cos(x) + i\sin(x)$ geschrieben) $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$. Setzt man $\psi(0) = \psi(L) = 0$, weil die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen ausserhalb des Topfs zu finden, null ist, gilt $A = -B$, $Ae^{ikL} + Be^{-ikL} = Ae^{ikL} - Ae^{-ikL} = 2iA\sin(kL) = 0$ und $kL = n\pi$ für $n \in \mathbb{N}$. Die Gesamtwahrscheinlichkeit zwischen 0 und L ist 1 . Integriert man also $|\psi(x)|^2$ gemäss (4), bekommt man $A = \frac{1}{\sqrt{2L}}$. Die möglichen Lösungen ψ_n und die Energiewerte E_n sind somit

$$\psi_n(x) = i\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$$

für $n \in \mathbb{N}$. Die Lösungen sind analog zu einer bei 0 und L festgehaltene Saite, die nur auf ganz bestimmte Weise schwingen kann (Grundton, Oktave und so weiter).

4.2 Wasserstoffatom

Das Wasserstoffatom in der Quantenmechanik mit dem Elektron, das um das viel schwerere Proton kreist, entspricht dem Zweikörperproblem der klassischen Mechanik, bei dem ein vergleichsweise leichter Planet um einen bedeutend schwereren Stern kreist. Wie in diesem Fall kann man durch geeignete Wahl des Koordinatensystems die Bewegung des Schwerpunktes von der relativen Bewegung der beiden Teilchen abkoppeln und die Anziehungskraft durch ein Potential beschreiben.

Weil die Coulomb-Kraft sich nicht zeitlich ändert, benutzt man wieder die Schrödingergleichung in der Form (8), die damit zu

$$E\psi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\psi(\mathbf{r})$$

wird mit r als Abstand zwischen Proton und Elektron, ϵ_0 als Dielektrizitätskonstante und m als reduzierte Masse, die aber hier auch genähert als Masse des Elektrons genommen werden darf, weil das Proton viel schwerer als das Elektron ist.

Wie üblich in rotationssymmetrischen Situationen vereinfacht sich die Rechnerei, wenn man statt in kartesischen Koordinaten x , y und z zu rechnen zu Kugelkoordinaten r , φ und θ mit $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$,

$\varphi = \tan^{-1}(\frac{y}{x})$ und $\theta = \cos^{-1}(\frac{z}{r})$ übergeht. Dazu muss man aber auch den Laplace-Operator (2) mittels Kettenregel erst in Kugelkoordinaten umrechnen, was

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

ergibt, und was komplizierter aussieht, als es ist.

Wendet man einen für Physiker bekannten Trick an, indem man die Symmetrien ausnutzend den Ansatz $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$ macht und auf diese Weise die Funktion ψ in ein Produkt separiert, so wird aus der Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} & \frac{1}{R(r)} \sin^2(\theta) \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) + \frac{1}{\Theta(\theta)} \sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} \Theta(\theta) \right) \\ & + \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Phi(\varphi) + \frac{2mr^2 \sin^2(\theta)}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) \\ & = 0 \end{aligned} \tag{10}$$

mit vier Summanden. Subtrahiert man den dritten Summanden auf beiden Seiten der Gleichung (10), so bekommt man

$$\frac{\sin^2(\theta)}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) + \frac{\sin(\theta)}{\Theta(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{2mr^2 \sin^2(\theta)}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = - \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2}$$

und sieht, dass die rechte Seite nur von $\Phi(\varphi)$ und φ abhängt, während diese Grössen auf der linken Seite nicht vorkommen. Somit müssen beide Seiten eine konstante Grösse sein, für die m_l^2 geschrieben wird, wie später verständlich wird. Die so entstehende Differentialgleichung für die rechte Seite

$$- \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{\partial^2 \Phi(\varphi)}{\partial \varphi^2} = m_l^2$$

hat die Lösungen

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \varphi}$$

mit Normierung gemäss (4), und die sehen eigentlich noch recht einfach aus.

Die entsprechende Differentialgleichung für die linke Seite gibt

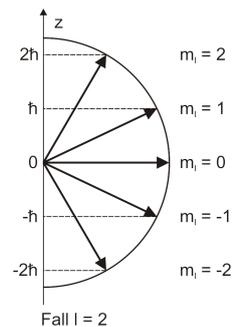
$$\frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} R(r) \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = - \frac{1}{\Theta(\theta) \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial \Theta(\theta)}{\partial \theta} \right) + \frac{m_l^2}{\sin^2(\theta)}$$

nach einfacher Umordnung und Division durch $\sin^2(\theta)$. Jetzt kommt links nur die Variable r und rechts nur die Variable θ vor, sodass wieder beide Seiten konstant sein müssen. Für diesen konstanten Wert sei $l(l+1)$ gewählt, was ebenfalls später verständlich wird. Daraus folgen wieder zwei unabhängige Differentialgleichungen, eine für θ und eine für r . Die Lösungen $\Theta_{l,m_l}(\theta)$ und $R_{n,l}(r)$ sollen hier nicht angegeben werden, weil sie zu kompliziert sind und den Rahmen dieser Arbeit sprengen würden. Die Zahlen n , l und m_l sind so genannte Quantenzahlen, die nur gewissen Werte annehmen können. (Die Quantenzahlen sind wie oben erwähnt die Eigenwerte zu den entsprechenden Eigenfunktionen.)

Die Lösungen der Differentialgleichungen für θ und φ können jetzt zu einem winkelabhängigen Lösungsteil $Y_{l,m_l}(\theta, \varphi) = \Theta_{l,m_l}(\theta) \cdot \Phi_{m_l}(\varphi)$ zusammengefasst werden. Weil Winkeländerungen in Beziehung zum Drehimpuls stehen, liegt es nahe, diesen winkelabhängigen Lösungsteil mit dem Operator für den Drehimpuls zu vergleichen. Solche weitergehenden Überlegungen führen zu den Beziehungen

$$l \in \mathbb{N}_0 \qquad m_l \in \mathbb{Z} \qquad |m_l| \leq l$$

für die Bahndrehimpulsquantenzahl l und die magnetische Quantenzahl m_l wie in der nebenstehenden Abbildung für $l = 2$ graphisch gezeigt. Nimmt man noch die radiale Quantenzahl n dazu, so zeigt sich, dass l nur die natürlichen Zahlen von 0 bis $n-1$ annehmen kann.



5 Schlussbemerkungen

5.1 Theorie und Praxis in der Physik

In der Physik führt die Theorie häufig zu sehr eleganten Formeln, die aber in der Praxis schwierig zu berechnen sind. Das Gesetz $\mathbf{F} = m \cdot \mathbf{a}$, also Kraft gleich Masse mal Beschleunigung, sieht sehr einfach aus. Weil jedoch die Kraft, die auf einen Massenpunkt wirkt, an jedem Ort \mathbf{r} verschieden sein kann und meist auch ist, sodass $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ eine Funktion des Ortes ist, und die Beschleunigung \mathbf{a} die zweite Ableitung des Ortes \mathbf{r} ist, entsteht eine Differentialgleichung, in der einerseits eine Funktion von \mathbf{r} und andererseits die zweite Ableitung von \mathbf{r} vorkommt. Für das Zweikörperproblem, bei dem sich zwei Körper wie Erde und Mond mit der Newton'schen Gravitationskraft anziehen, lassen sich noch Lösungen finden, aber bereits für das Dreikörperproblem kommt man nur noch mit Näherungen zum Ziel.

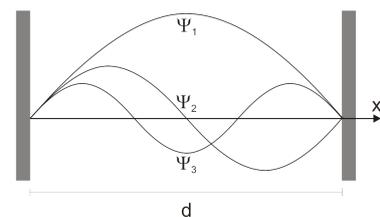
In der Quantenmechanik mit dem Laplace-Operator in der Schrödingergleichung, die ebenfalls noch recht einfach und elegant aussieht, wird die Situation nicht einfacher. Man kann zwar für einfache oder künstlich vereinfachte Probleme wie den unendlich hohen Potentialtopf Lösungen finden, aber schon das Wasserstoffatom als einfachstes Atom führt wie oben gezeigt zu mathematischen Fragestellungen, die weit jenseits der Kenntnisse von Studierenden der Mathematik in den unteren Semestern liegen. Die Allgemeine Relativitätstheorie liefert mit den Einstein'schen Feldgleichungen, die ebenfalls dank einer hochkonzentrierten mathematischen Notation für die Differentialgeometrie einfach aussehen, aber es gibt nur wenige Fälle wie die berühmte Schwarzschild-Lösung, die effektiv berechnet werden können.

Seit Newton verlangt die Physik mit ihrer vergleichsweise einfach aussehenden Theorie bei praktischen Problemen harte Knochenarbeit. Das Problem hat sich mit dem Übergang von der klassischen Physik erst zur Quantenmechanik und zur Allgemeinen Relativitätstheorie und anschliessend weiter zur Quantisierung der Feldtheorien noch weiter verschärft. Gleichzeitig sind beim Suchen nach Lösungen viele Erfahrungen und Tricks gewonnen worden. Dass beispielsweise Probleme mit Kugelsymmetrien einfacher in Kugelkoordinaten gelöst werden können, wie das bei der quantenmechanischen Behandlung des Wasserstoffatoms, aber auch bei der oben erwähnten Schwarzschild-Lösung der Einstein'schen Feldgleichungen der Fall ist, gehört zu diesen Erfahrungen.

5.2 Freie und gebundene Teilchen

Freie Teilchen verhalten sich in der Quantenmechanik anders als gebundene Teilchen. Sie können durch Wellenpakete beschrieben werden, die durch Dispersion immer mehr Raum einnehmen, sodass mit der Zeit immer weniger über Ort und Impuls des Teilchens bekannt ist.

Gebundene Teilchen hingegen zeigen Quantelungseffekte, sodass gewisse messbare Grössen nur ganze Zahlen sein können. Sowohl das Teilchen im unendlich hohen Potentialtopf wie auch das Elektron in einem Wasserstoffatom zeigen solches Verhalten. Die nebenstehende Abbildung ist eine Visualisierung davon. (Ähnlich wie die Saite eines Musikinstrumentes kann die Schwingung neben den beiden Auslenkungen am Rand, die immer 0 sein müssen, nur noch 0, 1, 2 und so weiter Nullstellen der Auslenkung haben müssen, und die Abstände zwischen zwei benachbarten Nullstellen müssen alle gleich sein.) Solche gequantelte Zustände sind oft recht stabil, und es stellt sich die Frage, wie Übergänge von einem solchen Zustand in den anderen physikalisch ablaufen.



5.3 Welle oder Teilchen

Die Frage, ob beispielsweise das Elektron eine Welle oder ein Teilchen sei, ist leicht zu beantworten, denn ein Elektron ist weder Welle noch Teilchen. Es zeigt aber Eigenschaften, die sich mathematisch am besten als Welle darstellen lassen, und andere Eigenschaften, die sich besser als Teilchen modellieren lassen. Die Zukunft wird vielleicht mathematische Modelle bringen, die das Verhalten des Elektrons beispielsweise befriedigender beschreiben lassen, als dies heute der Fall ist.