

2 Die Wellenmechanik

2.1 Die Schrödingergleichung

In nur zwei Jahren, von 1925 bis 1926, wurden zwei neue Wege zum Verständnis der atomaren Phänomene aufgetan. *Werner Heisenberg* (1901-1976) schuf seine *Matrizenmechanik* und *Erwin Schrödinger* (1887-1961) entwickelte seine *Wellenmechanik*. (*Schrödinger* und *Eckard* zeigten 1926 die mathematische Äquivalenz beider Theorien. Die *Schrödingersche* Theorie hatte jedoch später mehr Erfolg als die sehr abstrakte Theorie *Heisenbergs*.)

Schrödinger veröffentlichte 1926 seine neue Theorie in einer Serie von vier Artikeln in den *Annalen der Physik* unter dem Titel "Quantisierung als Eigenwertproblem" (**79**, 361; **79**, 489; **80**, 437; **81**, 109). *Heisenberg* stellte 1925 seine Version der Quantenmechanik in *Zeitschrift für Physik* vor (**33**, 879).

Im Mittelpunkt der "Wellenmechanik" von *Schrödinger* steht folgende Gleichung

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x,t) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad . \quad (1)$$

Sie heißt einfach *Schrödingergleichung*.

Gl. (1) ist eine partielle Differentialgleichung –wie auch die Wellengleichung einer gezupften Saite (Mechanik 7.2.1) und die Wellengleichung der elektromagnetischen Strahlung. Die Schrödingergleichung hat viele gemeinsame Eigenschaften mit diesen klassischen Gleichungen.

Man kann die Schrödingergleichung nicht aus allgemeinen Prinzipien *herleiten*, sie wird einfach *postuliert*. Man kann dies eine akzeptable Vorgehensweise nennen, solange ihre Folgerungen mit der Realität übereinstimmen: und das tun sie. (Für die relativistischen Anwendungen gibt es eine Variante von (1), die *Diracgleichung* genannt wird.)

Ψ , die *Wellenfunktion*, ist eine komplexwertige Funktion, mit der wir die Zustände dynamischer Systeme beschreiben. Das sind Teilchen, Atome, Gruppen von Teilchen usw. $U(x,t)$ ist die potenzielle Energie des Systems. Im Fall eines Elektrons mit der Ladung e in einem Potenzial $V(x)$ gilt $U(x) = e V(x)$.

Wir sehen also: zu jedem dynamischen System gehört in der Quantenmechanik eine Wellenfunktion $\Psi(x,t)$. Im Augenblick wollen wir uns nur darum kümmern, wie man die Funktion $\Psi(x,t)$ finden kann, die einem gegebenen System entspricht, das sich in einem bestimmten Zustand befindet.

Im Allgemeinen verändert sich der Zustand des Systems im Laufe der Zeit in einer komplizierten Art und Weise, sodass $\Psi(x,t)$ in den Koordinaten x und t nicht separierbar ist. Dennoch gibt es Fälle (Ausnahmen), in denen $\Psi(x,t)$ separabel ist und die folgende Gestalt hat

$$\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot \varphi(t) \quad . (2)$$

Das geschieht zum Beispiel, wenn $U(x)$ nicht explizit von der Zeit abhängt. (Das "große" Ψ in $\Psi(x,t)$ und das "kleine" Ψ in $\psi(x)$ sehen fast gleich aus. Ich werde daher immer die Koordinaten dazuschreiben, wenn die Gefahr einer Verwechslung besteht. Ein Ψ ohne die Koordinate t ist immer ein "kleines" Ψ . Die Methode der Separation der Variablen ist ausführlich in Mechanik 7.7.2 beschrieben worden.) Das Einsetzen von (2) in (1) –und die Division durch $\psi(x) \cdot \varphi(t)$ – liefert

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x) = i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} := E \quad (3)$$

worin E die Separationskonstante ist. Die Funktion $\psi(x)$, die nur eine Funktion von x ist, genügt der zeitunabhängigen Schrödingergleichung (4) (eine gewöhnliche Differentialgleichung):

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (E - U(x))\psi(x) = 0 \quad (4)$$

Wir zeigen weiter unten, dass die Konstante E nichts anderes ist als die Gesamtenergie des Systems. (Das war der Grund dafür, die Separationskonstante E zu nennen.) Gewöhnlich schreibt man Gl. (4) in einer einfacheren Form, nämlich

$$\mathbf{H} \psi = E \psi \quad , \quad (5)$$

worin \mathbf{H} wie folgt definiert ist:

$$\mathbf{H} := -\hbar^2/2m \cdot D^2 + U \quad (6)$$

mit $D := d/dx$ und $D^2 := d^2/dx^2$. Die Größe \mathbf{H} ist ein Operator und wird *Hamilton-operator* genannt (*W. R. Hamilton*, 1805 - 1865).

Die Verallgemeinerung des Operators D^2 auf drei Dimensionen ist der sogenannte *Laplaceoperator* (*J. G. Laplace*, 1749 - 1827), Mechanik 7.2.1:

$$\nabla^2 = \Delta := \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (7)$$

Man betrachtet die Symbole D , D^2 , \mathbf{H} usw. als Operatoren, die auf die Funktion einwirken, die rechts von ihnen steht. Im Augenblick dienen sie nur dazu, die zeitunabhängige Schrödingergleichung einfacher zu schreiben. Später werden wir diesen Operatoren ein ganzes Kapitel widmen, denn sie sind von grundlegender Bedeutung für eine symbolische Formulierung der Quantenmechanik. Im Mechanikkurs, Abschnitt 3.5, haben wir bereits den Operator D eingeführt. In 4.4 erscheint eine Gleichung des Typs (5). Eine Gleichung dieser Gestalt wird *Eigenwertgleichung* genannt, denn eine Lösung einer derartigen Gleichung ist ein *Eigenwert*. In der Mechanik wurden die Operatoren auf Vektoren angewandt, jetzt wirken sie auf eine Funktion ein, auf die Wellenfunktion $\psi(x)$.

In der symbolischen Formulierung der Quantenmechanik werden wir die ψ -Funktionen ebenfalls als Vektoren ansehen. Auf diese Weise erhalten wir eine beträchtliche Vereinfachung der Theorie.

Die Funktion $\varphi(t)$ ist Lösung der Gleichung

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} E\varphi(t) \quad (8)$$

Integration liefert $\int d\varphi/\varphi + c_1' = -iE/\hbar \int dt + c_2'$ oder $\int d\varphi/\varphi = -iE/\hbar \int dt + c'$, mit $c' = c_2' - c_1'$. Mit $c' := \ln c$ erhalten wir $\ln \varphi = -iEt/\hbar + \ln c$, oder

$$\ln \varphi = \ln e^{-\frac{iEt}{\hbar}} + \ln c = \ln(c \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}}) \quad \text{-und schließlich}$$

$$\varphi(t) = c \cdot e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (9)$$

Den Faktor c kann man gleich 1 wählen.

Wenn wir die Lösungen von (4) kennen, haben wir auch die allgemeine Lösung von (1), nämlich

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cdot \psi_n(x) \cdot e^{-iE_n t / \hbar} \quad (10)$$

Die Schrödingergleichung (4) enthält nicht die imaginäre Zahl i . Man nennt die Funktionen $\psi(x)$ auch *Eigenfunktionen*, sie werden immer mit dem kleinen Buchstaben ψ (Psi) bezeichnet. Die möglichen Energiewerte sind die Eigenwerte des Hamiltonoperators H .

Um die Anwendung von (4) zu illustrieren, betrachten wir ausführlich das folgende Beispiel eines Teilchens in einem "Potentialkasten" oder „Potentialtopf“.

2.2 Ein Teilchen in einem eindimensionalen "Kasten"

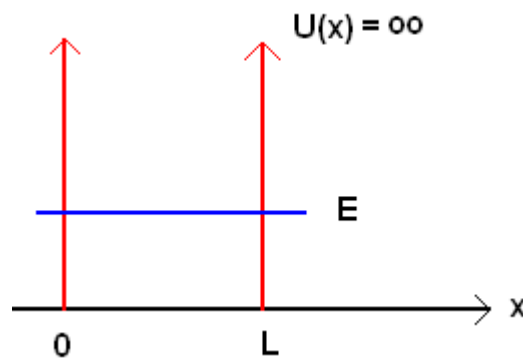


Fig. 1

Das Bild zeigt eine Strecke von $x = 0$ bis $x = L$, auf der sich ein Teilchen frei bewegen kann. An den Stellen 0 und L gibt es unendlich hohe „Wände“ der potenziellen Energie. Es handelt sich natürlich um ein leicht irrealer Beispiel, denn wir werden nie unendlich großen Kräften begegnen. Aber dennoch kann dieses Beispiel verschiedenen realen Situationen als Modell dienen. Das Teilchen wird in dem Kasten bleiben, und seine Materiewelle wird nach dem Zusammenstoß mit den Wänden mit sich selbst interferieren, ähnlich dem Fall der stehenden Wellen bei einer schwingenden Saite. Auch die Materiewellen haben an den Enden (an den Wänden) Knoten.

Die potenzielle Energie ist im Innern des Potentialkastens konstant. Wir werden sie bequemerweise gleich Null setzen. Gl. (4) lautet dann im Bereich $0 < x < L$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \psi(x) := -k^2\psi(x) \quad \text{mit} \quad k := \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Die Gleichung
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad (11)$$

ist formal identisch mit Gl. (9) –ebenfalls zeitunabhängig- des Paragraphen 7.2.2 der Mechanik, wo wir sie im Detail untersuchten. Auch bei der Untersuchung des einfachen Pendels (3.2.1) stießen wir auf eine ähnliche Gleichung. Die Lösung von (11) ist daher harmonisch von der Form

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad . \quad (12)$$

(Weiter unten in 2.4 werden wir auch die äquivalente Lösung in komplexer Form benutzen:

$$\psi(x) = A' e^{ikx} + B' e^{-ikx} \quad , \quad (13)$$

die man oft verwendet, da es i.Allg. einfacher ist, mit komplexen Funktionen zu arbeiten als mit trigonometrischen. Man darf (13) nicht mit einer Lösung der Form $y = C e^{kx} + D e^{-kx}$ verwechseln, denn diese ist eine Lösung der Differentialgleichung $y'' - k^2 y = 0$.)

Aber es existiert dennoch ein großer Unterschied zwischen unserer Gl. (11) und der Schwingungsgleichung $d^2u/dt^2 + \omega^2 u = 0$. Die unabhängige Variable ist hier die Zeit t und die Gleichung hat daher eine einzige Lösung, die zwei *Anfangsbedingungen* genügt.

Die Variable in Gl (11) ist eine Funktion des Ortes, und die Gleichung hat nicht nur eine Lösung, sondern eine Vielzahl von Lösungen (die Eigenfunktionen), die der Gleichung genügen und den *Randbedingungen*. Eine Gleichung wie (11) wird –wie schon gesagt- *Eigenwertgleichung* genannt.

Kehren wir nun zur Lösung von Gl. (11) zurück. Da die “Wände” unendlich hoch sind, kann das Teilchen nicht außerhalb des Kastens angetroffen werden. Also muss $\psi(x)$ außerhalb des Kastens und an den Wänden Null sein. Eine Lösung von (11) hat als folgende Randbedingungen zu erfüllen

$$\psi(0) = 0 \quad \text{und} \quad \psi(L) = 0 \quad (14)$$

Bestimmen wir nun die Konstanten A und B in der allgemeinen Lösung (12) mithilfe der Bedingungen (14):

$$\psi(0) = A \cdot (1) + B \cdot (0) = A = 0$$

Mit $\psi(L) = 0$ erhalten wir

$$\psi(L) = A \cdot \cos kL + B \cdot \sin kL = B \cdot \sin kL = 0$$

Wir können nicht verlangen, dass $B = 0$ ist, denn das würde bedeuten, dass $\psi(x) = 0$ für $0 < x < L$, d.h. es gäbe gar kein Teilchen im Kasten.

$\psi(L) = 0$ verlangt also $\sin(kL) = 0$. Das ist nur möglich, wenn kL ein ganzzahliges Vielfaches von π ist, d.h. wenn

$$k \cdot L = n \cdot \pi, \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Da $k = (2mE)^{1/2} / \hbar$, erhalten wir als erlaubte Energiewerte E_n

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \cdot n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (15)$$

Dies sind die Eigenwerte von (11), d.h. die Energieniveaus eines Teilchens in einem linearen Potentialkasten mit unendlich hohen Wänden. Wir sehen, dass es nur diskrete Energiewerte gibt, d.h. die Energie des Teilchens ist *quantisiert*.

(Wir notieren nur die positiven n-Werte, denn die negativen ergeben dieselben E_n -Werte.) Die Eigenfunktionen sind

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (16)$$

Es ist zu beachten, dass unsere Rechnungen sehr ähnlich sind denjenigen, die wir im 7. Kapitel der Mechanik durchführten im Falle der schwingenden Saite. Die *schwingende Saite* ist ein Modell für viele Anwendungen der *Schrödinger-gleichung*. Im Paragraf 7.2.2 (Gl.27) der Mechanik bestimmten wir ebenfalls den Faktor A_n , indem wir verlangten, dass die Eigenfunktionen *normiert* seien, d.h. wir verlangten, dass sie der folgenden Beziehung genügen

$$\int_0^L |\psi_n|^2 dx = 1 \quad (17)$$

(Jede Wellenfunktion, die die Gleichung $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1$ erfüllt, nennt man *normiert*, und zwar auf 1.)

Gleichung (17) sagt aus, dass die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen im Potentialkasten zu finden, gleich 1 ist. Über die Bedeutung von $|\psi|^2$ (= *Wahrscheinlichkeitsdichte*) werden wir im nächsten Kapitel sprechen.

Die Auswertung von Gl. (17) wird zeigen, dass die Faktoren A_n gleich sein müssen $(2/L)^{1/2}$, d.h. sie müssen denselben Wert haben wie die Faktoren b_n im Falle der schwingenden Saite.

Hier ist die Rechnung:

$$\begin{aligned} A_n^2 \int_{0,L} \sin^2(n\pi x/L) dx &= A_n^2 [x/2 - L/4n\pi \cdot \sin(2n\pi x/L)]_{0,L} \\ &= A_n^2 (L/2 - L/4n\pi \cdot \sin(2n\pi)) = A_n^2 L/2 = 1 \rightarrow \mathbf{A_n = (2/L)^{1/2}} \end{aligned}$$

Die Zahl n wird *Quantenzahl* genannt. Diese Zahl bestimmt einen möglichen Energiewert und auch die entsprechende Eigenfunktion.

Es ist sehr interessant zu sehen, dass ein Teilchen in einem Potentialtopf nicht die Energie $E = 0$ haben kann, d.h. dass es nie in Ruhe sein kann. Klassisch könnte das Teilchen alle positiven Energiewerte haben und auch $E = 0$.

In der Quantenmechanik bestimmt die Quantenzahl $n=1$ die *Nullpunktsenergie*, d.h. die kleinstmögliche Gesamtenergie. Alle *gebundenen* Teilchen haben eine Nullpunktsenergie.

Die mit dem Grundzustand ($n = 1$) verbundene Wellenfunktion lautet $\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{\pi x}{L})$. Die komplette Wellenfunktion ist

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \quad \text{für } 0 \leq x \leq L \quad (18)$$

Die Energieniveaus sind vom Quadrat von n abhängig: $E_n = E_1 n^2$. Wenn wir E_1 kennen, können wir die Energie der „angeregten“ Zustände berechnen: $E_2 = 4E_1$, $E_3 = 9 E_1$, $E_4 = 16 E_1$ usw. Die Energiedifferenz zwischen zwei benachbarten Niveaus beträgt

$$\Delta E = E_n - E_{n-1} = -\pi^2 \hbar^2 / (2mL^2) (2n - 1) \quad . \quad (19)$$

Man sieht, dass ΔE umso kleiner ist je größer L ist. Kommt man zu makroskopischen Topfgrößen, so ist ΔE praktisch Null. Das bedeutet, dass es im makroskopischen Bereich keine Quantisierung mehr gibt und dass E jeden Wert annehmen kann.

Wenn wir verallgemeinern, so können wir sagen, dass die Ergebnisse der Quantenmechanik mit den klassischen Erwartungen übereinstimmen, wenn wir die Mikrowelt verlassen. Dieses Ergebnis sehen wir gleich in den Illustrationen.

Das Bild stellt die vier ersten Eigenfunktionen dar, vgl. Gl. (16), zusammen mit den zugehörigen *Wahrscheinlichkeitsdichten* $|\psi|^2$. (Vgl. 3.6)

- `reset()://Die 4 ersten Eigenfunktionen eines Teilchens`
`L:=1://in einem Topf und die Wahrscheinlichkeiten`
`werte_n:= [1,2,3,4]:`
`y:=(x,n)->sin(n*PI*x/L):`
`kurven_y:=plot::Scene2d(plot::Function2d(subs(y(x,n),`
`n=werte_n[i]),`
`Color=RGB::Blue,x=0..L,Mesh=3000))$i=1..4:`
`werte_n:= [1,2,3,4]:`
`p:=(x,n)->sin(n*PI*x/L)^2:`
`kurven_p:=plot::Scene2d(plot::Function2d(subs(p(x,n),`
`n=werte_n[i]),`
`Color=RGB::Red,x=0..L,Mesh = 3000))$i=1..4:`
`plot(kurven_y,kurven_p)`

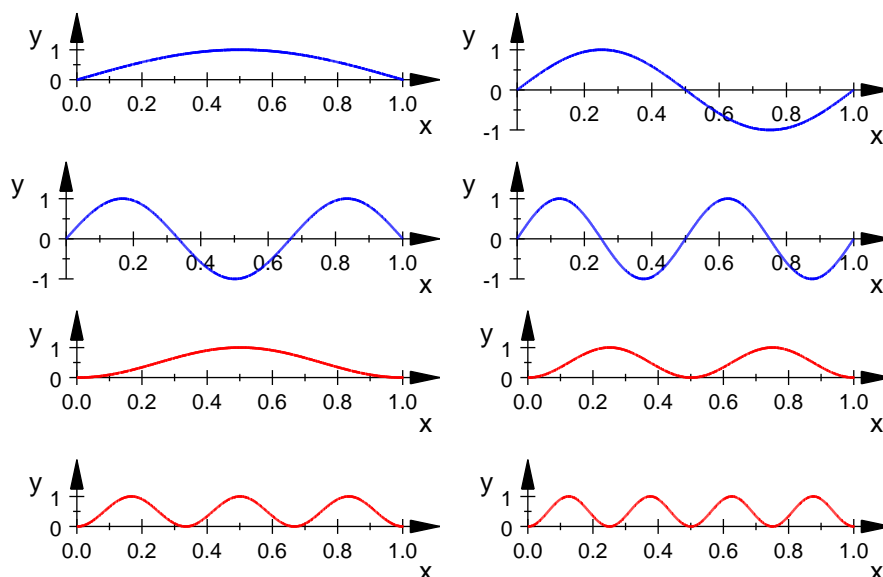


Fig. 2

Beachten Sie, dass die Zahl der Halbwellen bei jeder Eigenfunktion mit ihrer Quantenzahl n übereinstimmt. Die Zahl der Knoten ist $n+1$, wenn man auch die Extremstellen mitzählt (es gibt n Bäuche im Zustand n). (Die Graphen der Eigenfunktionen (16) ähneln denen einer schwingenden Saite.)

Die Graphen der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2$ zeigen mit wachsendem n eine zunehmende Anzahl von Schwingungen. Wenn n gegen Unendlich geht, sind die Schwingungen derart häufig, dass man in einem Experiment nur einen Mittelwert von $|\psi|^2$ bestimmen kann, der sich dem klassischen Wert nähert (blaue Linie in Fig. 3). Dies ist ein weiteres Beispiel dafür, dass sich für $n \rightarrow \infty$ die Quantenmechanik der klassischen Mechanik annähert. Dieses Verhalten wurde vom *Korrespondenzprinzip* der frühen Quantenmechanik vorhergesagt.

- `reset()://n--> Unendlich`
`n:=20:`
`L:=1:`
`c:= 1/L://klassische Wahrscheinlichkeit`
`p:=2/L*sin(n*PI*x/L)^2://Psi^2`
`plotfunc2d(c,p,XRange=0..L,YRange=0..2,`
`AxisTitles=["x","Psi^2"]):`

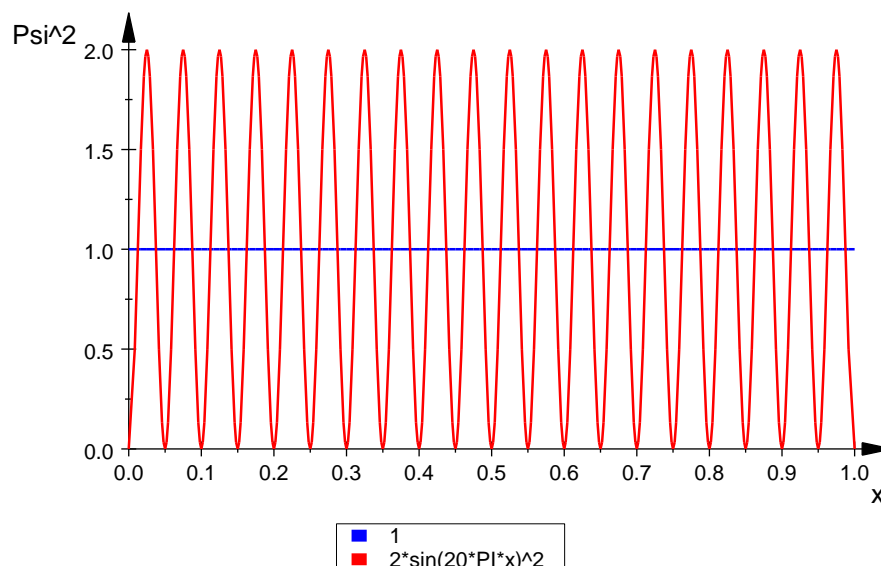


Fig. 3

Im Grundzustand, $n = 1$, sehen wir, dass die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zu finden, in der Mitte des Potentialtopfes am größten ist. Im ersten angeregten Zustand, d.h. für $n = 2$, ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen in der Mitte zu finden, Null usw. Nach der klassischen Mechanik befindet sich das Teilchen mit der gleichen Wahrscheinlichkeit ($= 1/L$) an irgendeiner Stelle im Topf, denn es bewegt sich mit konstanter Geschwindigkeit zwischen den Wänden, an denen es elastisch reflektiert wird, hin und her. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist eine Parallele zur x-Achse.

2.3 Beispiele

Zur Illustration des dargestellten Materials, betrachten wir einige Beispiele.

Beispiel 1:

Berechne mithilfe des Modells eines Teilchens in einem Potentialtopf die drei ersten Energieniveaus eines Neutrons ($m = 1,673 \cdot 10^{-27}$ kg), das sich in einem Kern aufhält, der einen Durchmesser von $L = 2 \cdot 10^{-5}$ nm ($1 \text{ nm} = 10^{-9}$ m) hat.

Lösung

$$E_1 = \hbar^2 \pi^2 L^{-2} / 2m = [(1,055 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}) \cdot \pi / 2 \cdot 10^{-14} \text{ m}]^2 / 2(1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}) \cdot (1,602 \cdot 10^{-13} \text{ J/MeV}) = \mathbf{0.12 \text{ MeV}}$$

$$E_2 = 4 \cdot 0,512 \text{ MeV} = 2,05 \text{ MeV}$$

$$E_3 = 9 \cdot 0,512 \text{ MeV} = 4,61 \text{ MeV}$$

Beispiel 2:

Ein Alphateilchen in einem Atomkern kann man sich als ein Teilchen vorstellen, das sich in einem Potentialtopf von $L = 10^{-14}$ m bewegt (dies ist ungefähr der Durchmesser eines Atomkerns).

Berechne für dieses Modell Energie und Impuls des Alphateilchens im Grundzustand. Die Masse des α -Teilchens beträgt $4 \cdot 1,66 \cdot 10^{-27}$ kg. Welches ist die Wellenlänge des Teilchens?

Lösung

$$E_1 = \hbar^2 \pi^2 L^{-2} / 2m = \dots = 10,97 \cdot 10^{-68} \text{ J} / [13,28 \cdot 10^{-55} \cdot 1,602 \cdot 10^{-13} \text{ J/MeV}] = 0.516 \text{ MeV}$$

$$p = \hbar \cdot k \text{ und } k = n\pi/L \rightarrow p_n = \hbar n \pi/L \rightarrow p_1 = \hbar \pi/L = 3,31 \cdot 10^{-20} \text{ kg m/s}$$

$$\lambda = h/p = 2 \cdot 10^{-14} \text{ m}$$

Beispiel 3:

Ein Elektron befindet sich zwischen zwei undurchdringlichen Wänden, die einen Abstand von $L = 0,2 \text{ nm} = 2 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ haben.

Welche Wellenlänge hat das Photon, das das Elektron ausstrahlt, wenn es von dem angeregten Zustand E_3 in den Grundzustand springt?

Lösung

Wenn ein geladenes Teilchen von einem Zustand E_n in einen tieferen E_m springt, sendet es die Energiedifferenz als Photon der Frequenz f aus. Es gilt dann $E_n - E_m = h \cdot f$. (Im umgekehrten Prozess wird ein Photon der Energie $h \cdot f$ vom Elektron im Zustand E_m absorbiert und geht in den höheren Zustand E_n über.)

Mit der Gleichung $E_n = E_1 \cdot n^2$ und $E_1 = h^2/8mL^2 = 0,1506 \cdot 10^{-17} \text{ J} = 9,4 \text{ eV}$, erhalten wir $E_3 = 84,6 \text{ eV} = 1,355 \cdot 10^{-17} \text{ J}$.

Also ist $h \cdot f = E_3 - E_1 = 1,205 \cdot 10^{-17} \text{ J}$ und $f = 0,182 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1}$. Das ergibt für die Wellenlänge: $\lambda = c/f = 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1} / 0,182 \cdot 10^{17} \text{ s}^{-1} = 1,65 \cdot 10^{-8} \text{ m} = 16,5 \text{ nm}$.

Diese Wellenlänge liegt im entfernten Ultraviolett.

2.4 Lösung des Potentialtopfproblems mit komplexen Zahlen.

Wie oben, S.5, bereits angekündigt, werden wir das Teilchen im Topf nun komplex angehen. Am Ende der komplexen Rechnungen benutzen wir den Realteil (oder auch den Imaginärteil), um ein physikalisches Resultat zu erhalten. (Wir dürfen diese bei der komplexen Rechnung auftretenden Funktionen nicht mit der Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ der Schrödingergleichung verwechseln, denn diese ist von Geburt an komplex.)

Seien $\Psi_1(x) = e^{ikx}$ und $\Psi_2(x) = e^{-ikx}$ partikuläre Lösungen von Gleichung (11).

Die allgemeine Lösung ist eine Linearkombination dieser partikulären Lösungen:

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (20)$$

$$x = 0: \quad \psi(0) = A + B = 0 \quad \rightarrow B = -A$$

Wir setzen dies in Gl. (20) ein und erhalten

$$\Psi(x) = A (e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin kx$$

Wir ersetzen $2iA$ durch C :

$$\psi(x) = C \sin kx, \quad C = \text{komplex} \quad (21)$$

$x = L$: Wir wissen, dass die Wellenfunktion für $x > L$ Null ist. Wir müssen daher fordern, dass $\psi(x)$ auch in $x = L$ Null ist, damit die Wellenfunktion in diesem Punkt stetig ist. Die Bedingung lautet

$$\psi(L) = C \cdot \sin kL = 0$$

C muss von Null verschieden sein, da $\psi(x)$ andernfalls überall Null wäre -und es würde kein Teilchen existieren.

Daher haben wir $\sin kL = 0$ mit den Lösungen $kL = n\pi$; $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ Wir setzen dies in Gl. (21) ein und erhalten die folgenden möglichen Funktionen

$$\psi_n(x) = C_n \sin (n\pi x/L) \quad (22)$$

Den Parameter C_n bestimmen wir mithilfe der Normierungsbedingung

$$\int_0^L \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = 1 \quad , \quad (23)$$

worin ψ_n^* die komplex Konjugierte von ψ_n ist. $|\psi_n|^2 = \psi_n^* \cdot \psi_n = \text{Quadrat des Betrages von } \psi_n$.

Aus (23) folgt $C_n^* C_n \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1$. Da das Integral $L/2$ ist, erhalten wir $C_n^* C_n = \frac{2}{L}$

mit der Lösung $C_n = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{i\gamma}$.

γ kann jeden reellen Wert annehmen. Die physikalische Bedeutung der Wellenfunktion hängt nicht von γ ab, denn $|e^{i\gamma}| = 1$, und die Wellenfunktion ist damit normiert. Die eigentliche Wellenfunktion $\Psi(x,t)$ hat keine direkte physikalische Bedeutung, denn sie ist komplexwertig. Nur $|\psi|^2$ kann physikalisch interpretiert werden, und der Wert von $|\psi|^2$ ist unabhängig von irgendeinem Faktor, der bei $\psi(x)$ stehen könnte.

Unsere Schlussfolgerung ist, dass die Eigenwerte eines Teilchens in einem Potentialtopf gegeben sind durch

$$E_n = (nh)^2/8mL^2 = \hbar^2 \pi^2 / (2mL^2) \cdot n^2, \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Die dazugehörenden Eigenfunktionen sind

$$\psi_n(x) = e^{i\gamma} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (24)$$

Der Vergleich mit (16) zeigt, dass die komplexe Rechnung einen komplexen Faktor liefert, der aber keine physikalische Bedeutung hat.

2.4.1 Das Normierungsproblem (freies Teilchen)

Wir wollen einige Bemerkungen zum Problem der *Normierung* machen.

Wir sahen schon, dass es keine Normierungsprobleme bei den Wellenfunktionen *gebundener* Teilchen gibt. Aber es gibt Schwierigkeiten im Falle *freier* Teilchen (ein Teilchen in einem konstanten Potential). Die Energieniveaus eines gebundenen Teilchens bilden ein diskretes Spektrum, freie Teilchen hingegen haben ein kontinuierliches Energiespektrum –und in diesem Fall ist es nicht möglich, Gleichung (23) zu erfüllen.

Aber dieses Problem mit freien Teilchen löst man ganz einfach dadurch, dass man deklariert, dass derartige Teilchen nicht existieren. Alle realen Teilchen sind auf die eine oder andere Art gebunden.

Im Falle eines “freien Teilchens” mit $U(x) = \text{konst.} = 0$ nimmt die zeitunabhängige Schrödingergleichung die Form der Gl. (11) an mit der allgemeinen Lösung (13) oder (20):

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (25)$$

Wir haben keine Randbedingungen zu berücksichtigen. Um die Lösung zu interpretieren, betrachten wir den Fall $B = 0$. Die entsprechende Wellenfunktion ist dann

$$\Psi(x,t) = A e^{-iE t/\hbar} e^{ikx} = A e^{i(kx - E t/\hbar)}, \quad (26)$$

die wir wie folgt schreiben können: $\Psi(x,t) = A \cos(kx - E t/\hbar) + i A \sin(kx - E t/\hbar)$. (Wir erinnern uns, dass die Wellenfunktion eines *gebundenen* Teilchens folgendermaßen lautet: $\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{-i\omega t}$ mit $\omega = E/\hbar$, Gl. 10)

Es handelt sich um die Gleichung einer Welle, die sich in der Richtung wachsender x -Werte ausbreitet und mit der Frequenz $\omega = E/\hbar$ schwingt.

Das Produkt $\Psi^*(x,t) \Psi(x,t)$ ist die *Wahrscheinlichkeitsdichte* (vgl. das folgende Kapitel) und hat die Form

$$\Psi^*(x,t) \Psi(x,t) = A^* e^{-i(kx - E t/\hbar)} A e^{i(kx - E t/\hbar)} = A^* A \quad (27)$$

Das Integral über $\Psi^*(x,t) \Psi(x,t) = A^* A$ zeigt das Normierungsproblem, von dem wir vorhin sprachen:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx = A^* A \int_{-\infty}^{\infty} dx = 1$$

denn das letzte Integral ist unendlich -und es ist nicht möglich, die Wellenfunktion zu normieren.

Wir haben schon gesehen, dass das Problem von unserem unrealistischen Modell herrührt. Eine bessere Behandlung des Problems besteht darin, eine realistischere Wellenfunktion für das Teilchen zu benutzen. Man kann nämlich eine große Anzahl von Wellenfunktionen der Form (26) benutzen, jede mit anderen Werten für k und E :

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \Psi_n(x,t) \quad , \quad (28)$$

worin $\Psi_n(x,t) = e^{-iE_n t/\hbar} \cdot e^{ik_n x}$.

Auf diese Weise können wir ein *Wellenpaket* konstruieren, das einem wirklichen Teilchen ähnlich sieht und auf jeden Fall der Realität besser entspricht. In einem späteren Paragraphen werden wir derartige Wellenpakete konstruieren.

Im nächsten Kapitel werden wir auf die hier besprochenen Hauptpunkte zurückkommen. Vor allem aber werden wir die *Postulate* der Quantenmechanik darstellen.

Zum Schluss wird die *Heisenbergsche* Unschärferelation eingeführt.