3 Die Interpretation von Ψ

3.1 Die Postulate

Die klassische Mechanik steht auf dem Fundament der drei *Newtonschen Gesetze*. Die Quantenmechanik kann aus fünf *Postulaten* oder Axiomen hergeleitet werden. Im Zentrum der neuen Theorie steht die *Schrödingergleichung*, die nicht rein logisch aus anderen, fundamentaleren, Gleichungen abgeleitet werden kann. Die verschiedenen “Ableitungen”, die man in der Literatur finden kann, sind nur Versuche, mit plausiblen Argumenten die Schrödingergleichung zu illustrieren.

Schrödinger fand seine Gleichung durch genaue Analyse des experimentellen Materials und mithilfe erfolgreicher Vermutungen.

Sein Ausgangspunkt war die Wellentheorie von *de Broglie*,1-11. Die Wellenfunktion der Quantenmechanik ist grundsätzlich komplexwertig, und man kann ihr direkt keine physikalische Bedeutung beimessen wie der “Wellenfunktion" der klassischen Mechanik. Eine komplexe Größe kann von keinem Instrument gemessen werden. Aber obgleich die Funktion ψ in sich selbst keine messbare Größe ist (sie ist keine *Observable*), lassen sich dennoch alle Messgrößen –wie Energie und Impuls eines Teilchens – mithilfe der Kenntnis von ψ berechnen.

Die Verbindung mit der realen Welt wird von den beiden letzten der 5 Postulate hergestellt, die wir nun formulieren werden.

1. Postulat

Zu jedem System mit einem Freiheitsgrad gehört eine Wellenfunktion $\Psi(x,t)$.

2. Postulat

$\Psi(x,t)$ genügt der Schrödingergleichung

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} - U(x,t)\,\Psi(x,t) = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \quad (1)$$

3. Postulat

$\Psi(x,t)$ und $\partial\, \Psi(x,t)/\partial\, x$ müssen für alle x endlich, stetig und eindeutig sein.

4. Postulat

$\Psi(x,t)$ muss normiert sein: $\int_{-\infty}^{\infty} |\,\Psi(x,t)\,|^2 \, dx = 1$ (2)

5. Postulat

Eine dynamische Variable (= Observable) Q, wie Ort, linearer Impuls, Energie usw. muss durche einen entsprechenden *Operator* Q_{op} ersetzt werden.

Observable		Operator
x	→	x
F(x)	→	F(x)
P_x	→	$\hbar/i \cdot d/dx$
E	→	$-\hbar/i \cdot d/dt$

usw.

Der *Erwartungswert* der Variablen Q wird mit dem folgenden Integral berechnet:

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* Q_{op} \Psi \, dx \quad (3)$$

3.2 Kommentare

1. Postulat:

Die Gegenwart von $i = \sqrt{(-1)}$ in Gl. (1) impliziert, dass $\Psi(x,t)$ eine komplexe Größe ist. Wenn wir schreiben

$$\Psi(x,t) = f(x,t) + ig(x,t)$$

worin f und g reell sind, und dies in Gleichung (1) substituieren, erhalten wir für f und g zwei gekoppelte Gleichungen

$$-\hbar/m \cdot \partial^2 f(x,t)/\partial x^2 + U(x,t)\, f(x,t) = -\hbar \cdot \partial\, g(x,t)/\partial t$$

$$-\hbar/m \cdot \partial^2 g(x,t)/\partial x^2 + U(x,t)\, g(x,t) = +\hbar \cdot \partial\, f(x,t)/\partial t \quad ,$$

was besagt, dass keine der beiden Funktionen allein eine Lösung von (1) ist. Wir müssen als Lösung eine komplexe Funktion benutzen.

Um die komplex Konjugierte $\Psi^*(x,t)$ von $\Psi(x,t)$ zu bilden, ersetzen wir i durch -i

$$\Psi^*(x,t) = f(x,t) - ig(x,t)$$

Die Größe $\Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t)$ ist immer reell und positiv:

$$\Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) = |\Psi|^2 = (f-ig)\cdot(f+ig) = f^2 + g^2$$

2. Postulat:

Wenn die potenzielle Energie U(x,t) nur vom Ort abhängig ist, kann man $\Psi(x,t)$ als Produkt schreiben: $\Psi(x,t) = \psi(x)\cdot\varphi(t)$. Die nur von x abhängige Funktion muss dann der folgenden Gleichung genügen

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (E - U(x))\psi(x) = 0 \quad (3)$$

E = Gesamtenergie des Systems

$\varphi(t)$ muss folgender Gleichung genügen: $\frac{d\phi(t)}{dt} = -\frac{2\pi i}{h} E \cdot \phi(t)$ (4)

$h = 6{,}626\cdot 10^{-34}$ Js; (Planck-Konstante)

$\hbar := h/2\pi$ (“h-quer”)

Die Lösung von (4) lautet: $\phi = \phi_0 \cdot e^{-iEt/\hbar}$ (5)

3. Postulat:

In Wirklichkeit fußt dieses Postulat auf dem Verhalten einer klassischen Welle. Betrachten wir den Fall der schwingenden Saite. Die Auslenkung u(x,t) der Saite ist an allen Stellen x im Intervall $0 \leq x \leq L$ natürlich endlich, stetig und eindeutig. Dieselben Eigenschaften müssen wir auch von den Wellenfunktionen in der Quantenmechanik erwarten. Wir wollen eine Funktion, die Postulat 3 erfüllt, *wohlverhalten* nennen. (Es gibt allerdings derart "pathologische" Fälle, wie z.B. ein Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden, dass man bei ihnen nur schwerlich von einem *Wohlverhalten* sprechen kann.) Eine Möglichkeit, sich gegen derartige Fälle zu schützen, wäre eine Änderung des Postulats, z.B.

$\Psi(x,t)$: eindeutig (bis auf eine Phase), endlich und stetig für alle x

$\partial\Psi/\partial t$, $\partial\Psi/\partial x$: endlich und stetig (außer für $U(x,t) \rightarrow \pm \infty$)

$\partial^2\Psi/\partial x^2$: endlich (außer für $U(x,t) \rightarrow \pm \infty$)

Außerdem, um die Schrödingergleichung (3) anwenden zu können, muss man $d^2\psi/dx^2$ berechnen, was nur ohne Probleme möglich ist, wenn auch $d\psi/dx$ stetig ist –was aber nur möglich ist, wenn auch ψ stetig ist.

Im Fall eines Teilchens in einem Kasten mit undurchdringlichen Wänden gibt es Unstetigkeiten in der ersten Ableitung. Diese treten an den Wänden des "Kastens" auf und entstehen nur dadurch, dass die ganze Anordnung eine Fiktion ist.

Interessant ist es, den Fall einer "**Potentialstufe**", Fig.1, zu analysieren. Wir werden zeigen, dass die erste Ableitung von ψ(x) in diesem Fall (keine unendlich hohen Wände usw.) stetig ist, und das bedeutet, dass ψ selbst stetig ist.

Wir werden die Schrödingergleichung im Bereich von $x = 0 - \varepsilon$ bis $x = 0 + \varepsilon$ integrieren, wobei wir annehmen, dass U(x) in x = 0 einen abrupten, aber endlichen Sprung macht.

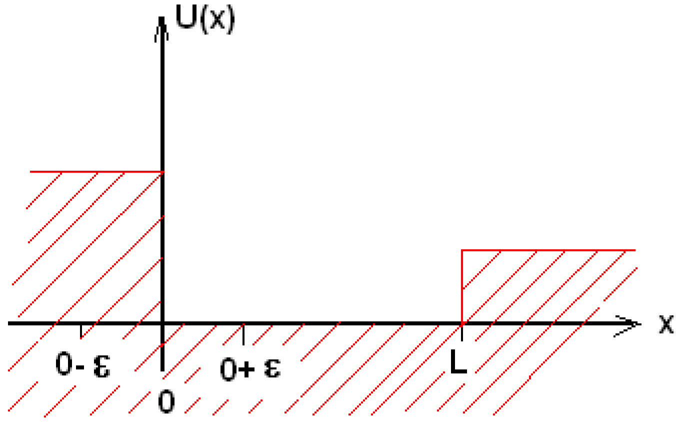

Fig. 1

Wir werten das Integral $\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+(E-U(x))=0$ mithilfe der folgenden Beziehung aus

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}dx=\left[\frac{d\psi(x)}{dx}\right]_{0-\varepsilon}^{0+\varepsilon}=\frac{d\psi(+\varepsilon)}{dx}-\frac{d\psi(-\varepsilon)}{dx}$$

Es ergibt sich

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

Das Integral strebt mit ε→0 ebenfalls gegen Null, und wir bleiben mit dψ(+ε)/dx = dψ(-ε)/dx, d.h. die erste Ableitung der Funktion ψ(x) ist in x = 0 stetig – und damit auch ψ(x) selbst.

Analog zeigt man, dass ψ(x) und dψ(x)/dx in x = L stetig sind.

4. Postulat:

Die Größe p(x,t) := $\Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$ heißt *Wahrscheinlichkeitsdichte*.

Schon 1926 hat *Max Born* (1882-1970) die folgende Bedeutung von p(x,t) in Zeitschr. f. Physik, **37**,863 (1926) formuliert:

Wenn $\Psi(x,t)$ ein einziges Teilchen darstellt, dann ist $|\Psi(x,t)|^2 \cdot dx$ die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Intervall (x, x+dx) zu finden.

Da das Teilchen bestimmt in einem Punkt der x-Achse ist, muss die Summe der Wahrscheinlichkeiten über alle x-Werte gleich 1 sein. (Wenn das Integral Null wäre, gäbe es das Teilchen nicht.)

Jede Wellenfunktion, die Gleichung (2) erfüllt, heißt *normiert*. Die Normierung ist die einfache Bestätigung dafür, dass das Teilchen zum Zeitpunkt t irgendwo sein muss.

$\int_a^b |\Psi|^2 \, dx$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen im Intervall $a \leq x \leq b$ zu finden. (Beachte: $|\Psi|^2$ = *Dichte der Wahrscheinlichkeit*, $|\Psi|^2 dx$ = *Wahrscheinlichkeit*. Manchmal wird Ψ als *Amplitude der* Wahrscheinlichkeit bezeichnet.)

In einm *stationären Zustand* lautet die Wellenfunktion $\Psi(x,t) = \psi(x) \cdot e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$.

Die ganze Zeitabhängigkeit von Ψ steckt in dem Faktor $e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$ vom Betrag 1.

(Ein Quantensystem kann in stationärer Weise in gewissen Zuständen verweilen, in denen die Energie einen präzisen Wert E hat. In diesen stationären Zuständen hat die Wellenfunktion die eben erwähnte Form. Die stationären Zustände sind die Eigenfunktionen des Energie-Operators oder einfacher ausgedrückt, sie sind die *Eigenfunktionen der Energie*.)

Die Wahrscheinlichkeitsdichte in einem stationären Zustand ist unabhängig von der Zeit, denn

$$\int \Psi^*(x,t) \cdot \Psi(x,t) dx = \int (\psi(x) \cdot e^{iEt/\hbar}) \cdot (\psi(x) \cdot e^{-iEt/\hbar}) dx = \int \psi(x)^2 \, dx \ ,$$

das heißt: $|\Psi_n(x,t)|^2 = |\psi_n(x)|^2$.

5. Postulat:

Zu einer physikalischen Größe gehört ein **Operator.**

Die Vorhersagen der Quantenmechanik sind von statistischer Natur, und die möglichen Ergebnisse eines an einem Teilchen durchgeführten Experiments müssen wir als *Erwartungswert* <Q> berechnen. Wir können <Q> als Mittelwert der Observablen Q betrachten, den man als Ergebnis eines Experiments erwartet.

Um zum Beispiel den Erwartungswert der x-Koordinate zu bestimmen, d.h. die mittlere Position, die man in einem Experiment an dem Teilchen als Ergebnis erwartet, müssen wir wie folgt rechnen

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x_{op} \Psi \, dx = \int x \, |\psi|^2 \, dx \quad , \qquad (6)$$

denn nach 3.1 ist der Operator von x nichts anderes als x . Der Operator einer Funktion, die explizit nur von x abhängt, ist nach 3.1 die Funktion selbst, d.h. $F(x)_{op} = F(x)$.

Das Ergebnis irgendeiner Messung einer Observablen kann nur einer der Eigenwerte des entsprechenden Operators sein. Nach der Messung befindet sich das System im Zustand der entsprechenden Eigenfunktion. (Über die Operatoren von p^2 und E_{kin} vgl. 4.4.3)

3.3 Erwartungswerte

Beispiel 1:

Nehmen wir irgendeine der Eigenfunktionen 2.2 Gl.(16) des undurchdringlichen Potentialtopfes:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \, sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right); \quad 0 < x < L \qquad (7)$$

Ohne eine wirkliche Rechnung auszuführen, können wir ahnen, dass <x> dieser Zustände gleich ist L/2, denn die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_n(x)|^2$ ist symmetrisch zum Punkt x = L/2, d.h. ψ_n (L/2 +x) = ψ_n (L/2 - x), vgl. mit Fig.2 in 2.2. (Wenn der Topf sich von –L/2 bis +L/2 erstrecken würde, wäre der Punkt x = 0 das Symmetriezentrum, und der Erwartungswert von x wäre <x> = 0, vgl. **Beispiel 2**.)

Um eine vollständige Rechnung durchzuführen, substituieren wir Gl. (7) in (6) und benutzen die Identität 2 $\sin^2 z = 1 - \cos 2z$.

$$\langle x\rangle = \frac{2}{L}\int_0^L x\, sen^2(\frac{n\pi x}{L})\,dx = \frac{1}{L}\int_0^L x dx - \frac{1}{L}\int_0^L x\cos(\frac{2n\pi x}{L})\,dx$$

Das erste Integral ist gleich $x^2/2$, was dem ersten Term den Wert I_1 = L/2 gibt. Mit der Substitution z = 2nπx/L können wir sehen, dass das zweite Integral Null ist. Wir müssen eine partielle Integration mit der Produktregel durchführen, d.h. mit ∫ u dv = uv - ∫ v du :

$$L^{-1}\int_{0,L} x \cos(2n\pi x/L)dx = L(2n\pi)^{-2}\int_{0,2n\pi} z \cos z \, dz$$

$$= L(2n\pi)^{-2}\,[z \sin z + \cos z]_{0,2n\pi} = 0 \qquad \text{Vgl. 4.6.1}$$

In Abschnitt 2.2 wurde gezeigt, dass die Eigenfunktionen (7) über (0,L) normiert sind, d.h. sie erfüllen das 4. Postulat.

Wir können auch zeigen, dass diese Funktionen ψ_n im selben Intervall gegenseitig orthogonal sind und daher eine *orthonormale* Menge bilden (vgl. auch den Abschnitt 7.2.2 in der Mechanik).

Den Nachweis können wir folgendermaßen führen (m und n sind verschiedene natürliche Zahlen):

$$\int_{0,L} \sin(m\pi x/L)\cdot\sin(n\pi x/L)dx =$$

$$=1/2 \int_{0,L} [\cos(m-n)\pi x L^{-1} - \cos(m+n)\pi x L^{-1}]dx = 0$$

Also bilden die ψ_n in (0,L) eine orthonormale Menge. In diesem Fall sind die ψ_n reell und Ψ_n^* und Ψ_n sind gleich. Da die Wellenfunktionen außerhalb von (0,L) Null sind, sind sie orthonormal für jedes x in (-∞, +∞).

Beispiel 2:

Oft ist es vorteilhafter, den Potentialkasten von –L/2 bis +L/2 zu wählen, d.h. der Integrationsbereich liegt symmetrisch zu x = 0. In diesem Fall erhalten wir zwei Reihen von Wellenfunktionen: eine für n = 1, 3, 5, ... und eine andere für n = 2, 4, 6, ... Die erste Reihe besteht aus Kosinusfunktionen $\psi_n(x) = (2L^{-1})^{1/2} \cos n\pi x/L$, die zweite aus Sinusfunktionen: $\psi_n(x) = (2L^{-1})^{1/2} \sin n\pi x/L$. Die Eigenwerte der Energie sind die üblichen: $E_{\mathbf{n}} = \hbar^2 \pi^2 n^2/ 2mL^2$, n = 1, 2, 3, 4, 5, ...

Die Wellenfunktion des Grundzustandes lautet

$$\Psi(x,t) = (2/L)^{1/2} \cos \pi x/L \cdot \exp(-iE_1 t/\hbar) \quad \text{mit } E_1 = \hbar^2 \pi^2/ 2mL$$

Benutze diese Wellenfunktion, um die Erwartungswerte von x, p, x^2 und p^2 zu berechnen. (<E> vgl. 4.6.3)

Lösung:

Der Erwartungswert von x ist gegeben durch

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx = \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2}{L} x \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx$$

Der Integrand ist ein Produkt aus $\cos^2 (\pi x/L)$, was eine gerade Funktion von x ist, und dem x , das eine ungerade Funktion ist. Das Integral ist Null, wenn wir – wie geschehen- als Zentrum des Intervalls x = 0 wählen. Elso ist <x> = 0.

Um <p> zu berechnen, benutzen wir den Operator $p_{op} = \hbar/i \cdot d/dx$ (vgl. 3-2):

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

$$\langle p\rangle = -i\hbar \int_{-L/2}^{L/2} \frac{2}{L} \cdot \frac{-\pi}{L} \cdot \cos \frac{\pi x}{L} e^{+iEt/\hbar} \cdot sin \frac{\pi x}{L} e^{-iEt/\hbar} \cdot dx$$

$$\langle p\rangle = \frac{i2\pi\hbar}{L^2} \cdot \int_{-L/2}^{L/2} \cos \frac{\pi x}{L} sin \frac{\pi x}{L} dx = 0$$

Der Integrand ist eine ungerade Funktion der Integrationsvariablen x, denn er ist das Produkt einer geraden Funktion, cos (πx/L), mit einer ungeraden, sin(πx/L), und das Integrationsintervall ist symmetrisch in Bezug auf x = 0. Also ist auch <p> = 0.

Dieses Ergebnis entspricht dem klassischen Resultat, nach dem das Teilchen sich mit konstanter Geschwindigkeit hin und her bewegt, also fortwährend seine Bewegungsrichtung ändert. Das Mittel der Messungen von **p** = m **v** ist Null. Also sind die Erwartungswerte von x un p ebenfalls Null.

$\langle x^2 \rangle$ berechnen wir mit dem Integral $\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx$, denn der Operator einer Funktion von x ist die Funktion selbst: $F(x)_{op} = F(x)$.

Durch Einsetzen der Wellenfunktion erhalten wir

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{L} dx \quad ,$$

was nicht Null ergibt, denn der Integrand ist eine gerade Funktion von x. Wir können das Integral vereinfachen, indem wir es von 0 bis L/2 berechnen. Mithilfe einer Integraltabelle erhalten wir

$$\langle x^2 \rangle = L^2(\pi^2-6)/12\pi^2 \approx 0{,}0327\, L^2$$

Die Quadratwurzel $\Delta x := \sqrt{\langle x^2 \rangle}$ ist die Unbestimmtheit in x (mittlere quadratische Abweichung) und ist ein Maß für die Fluktuationen um <x> = 0. Falls <x> von Null verschieden ist, berechnet man die Fuktuationen mit der verallgemeinerten Formel

$$\Delta x_{rms} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (8)$$

Der Index “rms” (root-mean-square Abweichung vom Mittel) zeigt an, dass es sich um die *Standardabweichung* σ von x in Bezug auf <x> handelt. Für den Impuls p gilt eine analoge Gleichung. Die Größe $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ wird *Varianz* von x genannt.

Normalerweise definiert man die Varianz V(x) – oder σ^2 bzw. $(\Delta x)^2$- folgendermaßen:

$$(\Delta x)^2 = <(x-<x>)^2>$$

Aus dieser Definition folgt das Theorem $(\Delta x)^2 = <x^2> - <x>^2$, denn

$(\Delta x)^2 = <(x-<x>)^2>=<(x^2 -2x<x> + <x>^2>= <x^2> - <x>^2$, da $<x<x>>=<x>^2$

Auf die gleiche Art folgt $(\Delta p)^2 = <(p - <p>)^2> = <p^2> - <p>^2$.

Um die Unsicherheit in p zu bestimmen, haben wir $<p^2>$ zu berechnen. Das aber ist einfach, da wir keine Integrale zu berechnen haben.

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2})\Psi\, dx = \int_{-L/2}^{L/2} \Psi^*(2mi\hbar \frac{\partial}{\partial t})\Psi dx$$

Das letzte Integral ergibt $2mE_1 \cdot \int \Psi^* \Psi dx = 2mE_1$, d.h. $<p^2> = 2mE_1$.

Die Wurzel aus $<p^2> = 2mE_1 = \hbar^2\, \pi^2/L^2$ ist die Unbestimmtheit von p.

Das Produkt $\Delta x \times \Delta p = \sqrt{< x^2 >} \times \sqrt{< p^2 >}$ hat den Wert $\Delta x \cdot \Delta p \approx 0{,}568\, \hbar$. Dieses Ergebnis steht in Übereinstimmung mit dem *Unbestimmtheitsprinzip* von *W. Heisenberg,* das verlangt, dass $\Delta x \times \Delta p \geq \hbar/2$ sein muss. Dieses Prinzip ist Gegenstand des nächsten Abschnitts.

3.4 Das Unbestimmtheitsprinzip

Werner Heisenberg (1901 - 1976) schickte im März 1927 einen fundamentalen Artikel über die *Unschärferelation* an die *Zeitschrift für Physik* (**43**,172 (1927)),

Zwei Jahre vorher veröffentlichte er -einige Monate vor Schrödinger- seine Version der Quantenmechanik. Im Dezember 1933 erhielt er den Nobelpreis für Physik des Jahres 1932.

Die “Unschärferelation” ist nicht nur eine *Relation*, sie ist ein fundamentales *Prinzip* der Natur – und die Quantenmechanik hat dieses Prinzip zu erfüllen.

Wir beschlossen den vorherigen Abschnitt mit der Relation $\Delta x \cdot \Delta p \approx 0{,}568\ \hbar$, die besagt, dass das Produkt der Ungenauigkeiten von x und p für ein Teilchen, das sich in einem undurchdringlichen Topf bewegt, von der Größenordnung der *Plankschen Konstanten* ist. Nach *Heisenberg* ist dieses Resultat nicht verwunderlich, denn er fand, dass es grundsätzlich nicht möglich ist, gleichzeitig und mit beliebiger Genauigkeit Ort und Impuls eines atomaren Teilchens zu messen. *Heisenberg* drückte diese traurige Nachricht mithilfe der folgenden Ungleichung aus

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \quad (9)$$

Eine zweite Ungleichung bezieht sich auf Zeit und Energie:

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar/2 \quad (10)$$

Gl. (10) sagt, z.B., dass wir dann, wenn wir eine Energiemessung in einem Zeitintervall Δt um den Zeitpunkt t durchführen, notwendigerweise eine Unbestimmtheit ΔE in der Energiemessung in Kauf nehmen müssen und dass ΔE durch (10) festgelegt ist.

Obgleich die Gleichungen (9) und (10) gleiche Form haben, sind sie sehr verschieden in der physikalischen Interpretation. Die Energie E und die Zeit t haben nicht dieselbe Symmetrie wie die Variablen p und x. E ist eine dynamische Variable, aber t muss als Parameter betrachtet werden.

Es wurden später sehr viele *Gedankenexperimente* ausgedacht, um das Unschärfeprinzip zu Fall zu bringen. *Einstein* war ein großer Könner bei diesen Bemühungen und akzeptierte die Unschärferelation nie.

(Ein *Gedankenexperiment* ist ein nur in Gedanken existierendes Experiment, das –obgleich es nicht realisiert werden kann-, keinem der Naturgesetze widerspricht. In einem derartigen Experiment können wir eine Kuh auf den Mond springen lassen und die Anfangsgeschwindigkeit berechnen, die für einen Kuhsprung nötig ist.)

Die meisten Personen, die sich mit Unschärfeproblemen beschäftigen, haben wohl keine Schwierigkeit damit, *Heisenbergs* Prinzip zu akzeptieren und anzuwenden. Selbst Philosphen können vom Prinzip profitieren, wenn sie beispielsweise der Frage nachgehen, ob man gleichzeitig gut und böse sein kann- und wenn ja, welches sind die grundsätzlichen Einschränkungen?...

Bevor wir zeigen, dass die Postulate der Quantenmechanik hinführen zum Unbestimmtheitsprinzip, schauen wir uns noch die folgende Formulierung des Prinzips für die Variablen x und p an:

> Es ist unmöglich, ein Messprinzip für x und p zu erfinden, dass gleichzeitig absolut exakte Werte dieser Variablen liefert.
>
> Die Ergebnisse derartiger Messungen haben grundsätzlich Ungenauigkeiten, die der Ungleichung $\mathbf{\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2}$ genügen müssen.

Das bedeutet: je genauer man die Position misst, desto ungenauer kennt man den Impuls.

Die folgende "Beweisführung" ist eine Modifizierung der Rechnungen *Heisenbergs* in seinem Buch *Physical Principles of Quantum Theory*, page 18. The University of Chicago Press 1930.

Die Herleitung beginnt mit einer evidenten Ungleichung: das Quadrat des Betrages einer komplexen Zahl kann nicht negativ sein. Anschließend werden nur Tatsachen aus der Quantenmechanik benutzt, die wir natürlich kennen. Es handelt sich also um eine Wiederholung der Dinge, die wir uns bereits erarbeitet haben.

Beginnen wir also mit der Ungleichung

$$|\psi' + (ax + b + ic)\psi|^2 \geq 0 \quad (11)$$

worin a, b, c reelle Konstanten sind, die wir weiter unten definieren werden. ψ' ist die Ableitung $d\psi/dx$.

Jetzt schreiben wir Gl. (11) als Produkt: (wir benutzen $\psi^{*\prime}$ anstelle von $d\psi^*/dx$)

$$[\psi^{*\prime} + (ax + b - ic)\psi^*]\,[\psi' + (ax + b + i\,c)\psi] = \psi^{*\prime}\psi' + (ax + b)(\psi\psi^{*\prime} + \psi^*\psi')$$

$$+ ic(\psi\psi^{*\prime} - \psi^*\psi') + a^2x^2\psi^*\psi + (b^2 + c^2)\,\psi^*\psi + 2abx\psi^*\psi \geq 0 \quad (12)$$

Diese ganze Rechnung scheint recht mystisch zu sein, aber mit Vertrauen werden wir unser Ziel erreichen. Dieses Ziel ist die Beziehung $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$.

Integrieren wir also nunächst einmal (12) über alle x-Werte!

$$\int\psi^{*\prime}\psi' dx + a\int x(\psi\psi^{*\prime} + \psi^*\psi')dx + b\int(\psi\psi^{*\prime} + \psi^*\psi')dx + ic\int(\psi\psi^{*\prime} - \psi^*\psi')dx$$

$$+ a^2\int\psi^* x^2\psi dx + (b^2 + c^2)\int\psi^*\psi dx + 2ab\int\psi^* x\psi dx \geq 0 \quad (13)$$

Jetzt stehen wir vor drei partiellen Integrationen. Wir benutzen die Tatsache, dass ψ an den Integrationsgrenzen verschwinden muss und erhalten

$$\int\psi^{*\prime}\psi' \, dx = - \int\psi^* \psi'' \, dx \quad (14)$$

$$\int\psi\psi^{*\prime} \, dx = - \int\psi^*\psi' \, dx \quad (15)$$

$$\int x(\psi\psi^{*\prime} + \psi^*\psi')dx = \int x \, (\psi^*\psi)'dx = -\int\psi^*\psi dx = -1 \quad (16)$$

Diese Integrale setzen wir in die Ungleichung (13) ein und benutzen ferner die bekannten Relationen

$\langle x\rangle = \int\psi^* x\psi \, dx$, $\langle x^2\rangle = \int\psi^* x^2\psi dx$, $\langle p\rangle = -i\hbar\int\psi^*\psi' \, dx$, $\langle p^2\rangle = -\hbar^2\int\psi^*\psi'' \, dx$,

um Folgendes zu erhalten:

$$\hbar^{-2}\langle p^2\rangle - a + 2c\hbar^{-1}\langle p\rangle + a^2\langle x^2\rangle + b^2 + c^2 + 2ab\langle x\rangle \geq 0 \quad (17)$$

Diese Relation ist für alle reellen Werte von a, b, c wahr. Die Frage ist, welche Werte müssen wir ihnen geben, um etwas Kurzes und Nützliches zu erhalten?

Die folgende Wahl scheint vielversprechend zu sein:

$$a := 1/(2(\Delta x)^2), \; b := - \langle x\rangle/(2(\Delta x)^2); \; c := - \langle p\rangle/\hbar \quad (18)$$

Tatsächlich verkleinert sich die Ungleichung (17):

$$\hbar^{-2} (\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2) - 1/(2(\Delta x)^2) + (\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2)/(4(\Delta x)^4) \geq 0 \quad (19)$$

d.h. $(\Delta p)^2/\hbar^2 - 1/(4(\Delta x)^2) \geq 0$ oder

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2 \quad (20)$$

Wir erhielten also eine der *Heisenbergschen Ungleichungen*, ohne dass wir auf Probleme der gleichzeitigen Messung von x und p eingehen mussten. Wir verwendeten nur die Postulate der Quantenmechanik. Die Person, die (20) abweist, lehnt gleichzeitig die Postulate ab. Es gibt, übrigens, direktere Demonstrationen als die unsrige, aber meist sind sie schwierig zu verfolgen.

Es ist wichtig, zu betonen, dass *Heisenberg* mit den Ungenauigkeiten keine Unvollkommenheiten der Messgeräte meinte. Er spricht von “Unschärfen”, die ihre Ursache im Messakt selbst haben und die nicht ausgechlossen werden können durch Verbesserung der Geräte oder Methoden.

Um ein Mikroteilchen, z.B. ein Elektron, zu “sehen”, wäre es nötig, irgendeine Strahlung auf das Teilchen zu richten, z.B. ein Photon. In diesem Prozess der Beobachtung wird das Teilchen einen Stoß erleiden und seinen Zustand ändern. (Wenigstens *ein* Photon muss in Wechselwirkung mit dem Teilchen treten. Bei der Reflexion von dem zu beobachtenden Teilchen wird das Photon diesem einen Teil seines Impulses übertragen –*Comptoneffekt*- .)

Je genauer wir das Teilchen lokalisieren wollen (d.h. Δx so klein wie möglich machen wollen), desto mehr werden wir seine Geschwindigkeit beeinflussen, d.h. eine Unsicherheit in seinem Impuls erzeugen.

Um andererseits Δp möglichst klein zu machen, müssen wir ein Photon mit möglichst kleiner Energie verwenden, d.h. λ muss so groß wie möglich sein, denn

$$\Delta p \approx h/\lambda \quad (21)$$

Die Wellenlänge des einfallenden Lichtes bestimmt die Unsicherheit Δx, d.h.

$$\Delta x \approx \lambda \quad (22)$$

(je kleiner λ, desto kleiner ist Δx).

Wenn wir (21) und (22) multiplizieren, ergibt sich

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx \lambda(h/\lambda) \approx h \quad (23)$$

(Die genauere Untersuchung zeigte, dass dieses Produkt $\geq \hbar$ sein muss. Unser Ergebnis stimmt im Wesentlichen mit (20) überein.)

3.4.1 Beispiele

Beispiel 1

Die Geschwindigkeit $v = 6000\ ms^{-1}$ eines Elektrons wurde mit einer Genauigkeit von 0,005% gemessen, d.h. $\Delta p/p = 0{,}00005$.

Wie groß ist die Unsicherheit in der Position des Elektrons?

Lösung

Impuls des Elektrons: $p = mv = (9{,}11\cdot 10^{-31} kg)\cdot 6000 m^{-1} = 5{,}466\cdot 10^{-27}\ kg\cdot m\cdot s^{-1}$.

Da $\Delta p = 0{,}00005\cdot p$, erhalten wir $\Delta p = 2{,}733\cdot 10^{-31}\ kg\cdot m\cdot s^{-1}$

$$\rightarrow \Delta x \geq \hbar/\Delta p = 3{,}86\cdot 10^{-4}\ m = 0{,}386\ mm$$

Beispiel 2

Ein Elektronenstrahl fällt senkrecht auf einen Spalt. der Breite $d=0{,}1\mu m = 10^{-7}m$ in Richtung z und wird von dem Spalt gebeugt.

Das erste Minimum erscheint unter dem Winkel α_1.

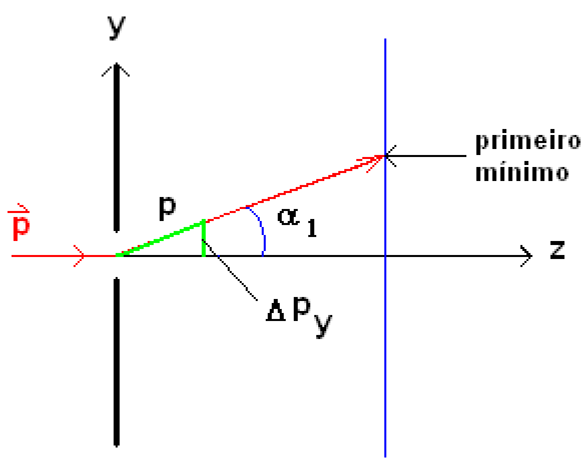

Fig.2

Berechne die Unsicherheit in der Geschwindigkeit der gebeugten Elektronen.

Lösung

Wegen ihres Wellencharakters werden die Elektronen in der y-z-Ebene gebeugt und erhalten einen senkrechten Impuls mit

$$\Delta p_y = p \cdot \sin\alpha. \quad (24)$$

(Vor dem Spalt hatten die Elektronen den genauen Impuls $p = h/\lambda$. Die Beugung ändert weder λ noch den Betrag $p = h/\lambda$ des Elektronimpulses.)

Die Positionen der Intensitätsminima auf dem Schirm sind gegeben durch

$$\sin\alpha_m = \pm\, m \cdot \lambda/d \quad (25)$$

Wenn wir nur die Elektronen betrachten, die zum ersten Minimum gelangen, so gilt:

$$\Delta p_y = p \cdot \sin\alpha_1 = p \cdot \lambda/d = h/\lambda \cdot \lambda/d = h/d \quad (26)$$

(Die Breite d des Spalts führt zu einer Unbestimmtheit $\Delta y = d$ in der Lage der Elektronen in y-Richtung.)

Da $p = m\,v$, ergibt sich $\Delta p_y = m \cdot \Delta v_y$. Wir erhalten damit

$\Delta v_y \approx \Delta p_y/m = h/(md) = 6{,}63 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{m\ s^{-1}}/(9{,}1 \cdot 10^{-31}\mathrm{kg} \cdot 10^{-7}\mathrm{m}) = 7286\ \mathrm{m\ s^{-1}}$

Beispiel 3

Bestimme die niedrigst mögliche Energie eines Elektrons in einem undurchdringlichen Potentialkasten der Breite $L = 2.5 \cdot 10^{-10}$ m.

Die Lage des Elektrons soll mit einer Genauigkeit von $0{,}2 \cdot 10^{-10}$ m bestimmt werden.

Ist es möglich, dass die einfallende Strahlung den Zustand des Elektrons ändert?

Lösung

Wir wissen, dass für das niedrigste Niveau in dem Kasten $E_1 = h^2/(8mL^2)$ gilt.

Mit den numerischen Werten ergibt sich $E_1 = 9{,}6 \cdot 10^{-19}$J = 6.0 eV.

Die Unschärferelation liefert $\Delta p \cdot \Delta x \approx \hbar/2$ com $\Delta x = 2 \cdot 10^{-11}$ m.

→ $\Delta p = 1.05 \cdot 10^{-34}$ Js/$4 \cdot 10^{-11}$ m = $2{,}6 \cdot 10^{-24}$ kg m s^{-1}

Diesen Wert müssen wir vergleichen mit dem Impuls des Elektrons im Grundzustand: $p_1 = h/2L = 1.32 \cdot 10^{-24}$ kg m s^{-1}

Man kann also behaupten, dass jede Strahlung den Zustand des Elektrons bei der Messung ändern wird.

Beispiel 4 (Breite von Spektrallinien)

Ein erregtes Atom (z.B. durch Bestrahlung mit Photonen) bleibt normalerweise etwa $\tau = 10^{-8}$ s im angeregten Zustand. Nach dieser Zeit (mittlere Lebensdauer des Zustands) strahlt das Atom die empfangene Energie wieder ab und geht in den Anfangszustand zurück. (Bei gewissen Atomen, z.B. im Fall der Phosphoreszenz, beobachtet man mittlere Lebensdauern von Minuten oder Stunden. Dies Atome sind *metastabil*.)

Verwende die Unschärferelation, um die Breite Δf der Spektrallinie zu berechnen, die nach dem Rücksprung des Atoms in den Anfangszustand beobachtet werden kann.

Lösung

Wir benutzen $\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar$, mit $\Delta E = h\,\Delta f$ und $\Delta t = 10^{-8}$ s. Wir finden

$$\Delta f = 1/\ 2\pi \cdot 10^{-8}\ \text{s} = 1{,}6 \cdot 10^{7}\text{Hz}$$

Beachte, dass ΔE die Unsicherheit der Energie im angeregten Zustand ist, aber auch die Unsicherheit der Energie des abgestrahlten Photons.

Wie groß wäre die relative Verbreiterung $\Delta f/f$, wenn die Wellenlänge der auftretenden Spektrallinie 500 nm betragen sollte?

Zunächst benötigen wir die zentrale Frequenz der Strahlung, d.h.

$$f_0 = c/\lambda = 3\cdot 10^8\ \mathrm{ms^{-1}} / 500\cdot 10^{-9}\ \mathrm{m} = 6\cdot 10^{14}\ \mathrm{Hz}$$

Damit ergibt sich $\Delta f/f_0 = 1{,}6\cdot 10^7\ \mathrm{Hz} / 6{,}0\cdot 10^{14}\ \mathrm{Hz} = 2{,}7\cdot 10^{-8} = 2{,}7\cdot 10^{-6}\ \%$

Diese *natürliche Linienbreite* ist sehr klein. Gewöhnlich wird sie verbreitert durch andere Effekte, z.B. durch Zusammenstöße mit anderen Atomen und durch den *Dopplereffekt.* Mithilfe eines empfindlichen Interferometers lässt sich die natürliche Linienbreite jedoch messen.