

Lutz Polley

Quantenmechanik:

Eine Einführung
auf der Grundlage von Energie und
Überlagerungsprinzip

Ausgearbeitete Kapitel von
Vorlesungen im WS 97/98

Vorläufige Version
Nicht zum kommerziellen Gebrauch

Vorwort

Als Ergänzung zu den Standardthemen einer Quantenmechanik-Vorlesung habe ich im Wintersemester 1997/98 in einigen Vorlesungsstunden zu zeigen versucht, wie man die Schrödingergleichung auf sehr einfache quantenmechanische Grundannahmen zurückführen kann. Der vorliegende Text ist eine Ausarbeitung dieser ergänzenden Kapitel.

Das wichtigste Anliegen war, die Hamiltonfunktion bzw. den Hamiltonoperator aus quantenmechanischen Betrachtungen zu *gewinnen* anstatt sie aus der klassischen Mechanik zu übernehmen. Die Idee dazu stammt aus dem Forschungsgebiet "Gittereichttheorie", in welchem man sich Materie-Teilchen nur an diskreten Gitterplätzen vorstellt, während elektromagnetische Felder (und ihre Verallgemeinerungen) auf den Verbindungsgliedern dazwischen sitzen. Nur bei dieser Art von *Diskretisierung* bleibt die feldtheoretisch wichtige "lokale Eichinvarianz" erhalten. Das elementare geometrische Konzept bewährt sich in der Theorie der Elementarteilchen hervorragend. Warum sollte es nicht auch eine Rolle in den allgemeinen Kursvorlesungen spielen?

In einem diskreten Raum kann sich ein Quantenteilchen dadurch bewegen, daß sich ein Orts-Zustand allmählich mit den Nachbarorts-Zuständen überlagert. Das ist die zentrale didaktische Idee dieser Einführung. Es scheint, daß sie sich nur im *Heisenbergbild* formal durchführen läßt, nämlich unter Verwendung der zeitabhängigen Basis "Ort x zur Zeit t ". Sollten LeserInnen eine Möglichkeit sehen, wie man im Schrödingerbild analog argumentieren kann, so bitte ich um Mitteilung¹.

Die Schrödingergleichung bringt einen spezifisch quantenmechanischen Zusammenhang zwischen Zeitentwicklung und *Energie* zum Ausdruck; dazu gehört auch das Konzept des "stationären" Zustands. Historisch war dies ein schwieriger Punkt. Rein systematisch betrachtet, repräsentieren stationäre Zustände aber gerade die Grundform von quantenmechanischer "Bewegung". Sie stehen daher am Beginn dieser Einführung.

Ich danke Jochen Pade für konstruktive Kritik an diesem Text; in wichtigen Punkten ließ sich die Darstellung gegenüber der Vorlesung verbessern.

¹polley@uni-oldenburg.de

Inhaltsverzeichnis

1	Energie als Kreisfrequenz	2
2	Drehungen und die komplexe e-Funktion	4
2.1	Additionstheorem	5
2.2	Ableitungsgesetz	5
3	Stationäre Systeme und die Energie	6
4	Unendlich schwerer Massenpunkt	8
5	Chemische Bindung am Beispiel H_2^+	9
6	Wahrscheinlichkeit von Meßergebnissen	13
7	Quantenteilchen in 1 Dimension	16
7.1	Hüpf-Terme und die Kinetische Energie	16
7.2	Impuls und Geschwindigkeit	20
7.3	Bemerkungen zum Gaußschen Wellenpaket	22
7.4	Potentielle Energie	23
8	Anschlußbedingungen	25
9	Tunneleffekt an der Rechteck-Barriere	27
9.1	Nebenbedingung beim Tunneleffekt	27
9.2	Wellenfunktion im Innern der Barriere	28
9.3	Tunnelwahrscheinlichkeit	29
9.4	Zusammenfassung	32
10	Quantenteilchen in 3 Dimensionen	33
11	Magnetfeld: Hüpfen mit Phasenverschiebung	35
A	Meßreihen und hermitische Operatoren	39
B	Anschlußbedingungen (alternativ)	42

1 Energie als Kreisfrequenz

Wir beginnen mit der Diskussion der Energie in der Quantenmechanik, weil sie unmittelbar mit dem einfachsten Typ von quantenmechanischer Bewegung zusammenhängt.

Galilei war noch der Ansicht, daß eine Kreisbahn (der Planeten) die Grundform aller Bewegung sei. In der Newtonschen Mechanik galt die unbeschleunigte geradlinige Bewegung als einfachste Bewegungsform. Dabei sind es in der klassischen Mechanik immer *Orte* von Teilchen, die sich bewegen. In der Quantenmechanik ist das Einfachste nun wieder eine Kreisbewegung, allerdings *nicht* von Teilchenorten. Vielmehr sind es, wie wir an vielen Beispielen illustrieren wollen, *Zustands-Vektoren*, die in einem *Hilbert-Raum* rotieren. Die Winkelgeschwindigkeit oder Kreisfrequenz dieser Rotation ist (abgesehen von einem universellen Vorfaktor) die *Energie* des Zustandes.

Energie und Frequenz bzw. Kreisfrequenz sind über die Plancksche Formel verknüpft:

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad \text{mit} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad \text{und} \quad \omega = 2\pi\nu \quad (1.1)$$

Ursprünglich (im Jahre 1900) bezogen sich Energie E und Frequenz ν nur auf elektromagnetische Wellen beim Photoeffekt. Heute weiß man, daß die Plancksche Formel eine universelle Bedeutung hat, die alle Formen von Energie umfaßt. Energie *ist* Frequenz; die Plancksche Konstante h bzw. \hbar ist lediglich traditionsbewahrende Konvention². In diesem universellen Sinne ist Energie jedoch nur zu verstehen, wenn man den begrifflichen Rahmen der Quantenmechanik zur Verfügung hat. Dazu gehört vor allem der Begriff des *Zustandsvektors*:

Axiom 1: Jedem Zustand eines Quantensystems liegt ein Vektor in einem abstrakten Vektorraum (Hilbert-Raum) zugrunde.

Hierin ist die Möglichkeit von *Überlagerungszuständen* enthalten, deren Eigenschaften “zwischen” den Eigenschaften der beteiligten Zustände liegen. Man kann sich Beispiele ausdenken, wo so etwas völlig absurd erscheint³.

²Man könnte die SI-Einheiten für Massen, Längen und Zeiten so modifizieren, daß der Zahlenwert beispielsweise von \hbar gleich 1 wäre.

³Etwa die Überlagerung von “tot” und “lebendig” bei Schrödinger’s Katze. Eine solche Überlagerung kann entstehen, wenn man das Leben der Katze vom Zustand eines einzelnen Atoms abhängig macht.

Auch kann durch Überlagerung ein Quantenzustand in einem anderen Quantenzustand mit ganz anderen physikalischen Eigenschaften *enthalten* sein. Aus solchen Gründen gilt der Begriff des Zustandsvektors immer noch, fast 100 Jahre nach der Entdeckung des Wirkungsquantums, als unanschaulich. Man hat jedoch gelernt, mit Zustandsvektoren theoretisch-physikalisch so umzugehen, daß man vollkommen zuverlässige Vorhersagen über Experimente damit machen kann.

Nun kann man Vektoren nicht nur addieren, sondern auch mit Zahlen multiplizieren; im Falle von Zustandsvektoren mit *komplexen* Zahlen. Mit einer komplexen Zahl befindet man sich in einer *Zahlenebene*, und dies ermöglicht vielfache Bewegungsformen. Insbesondere kann eine komplexe Zahl im Laufe der Zeit eine Kreisbewegung um den Ursprung ausführen. Wird ein Zustandsvektor mit einer solchen *rotierenden Zahl* multipliziert, so rotiert er auch im Hilbertraum. Auf diese abstrakte, aber durchaus “vorstellbare” Kreisbewegung bezieht sich

Axiom 2: Energie ist (bis auf einen Faktor \hbar) die Kreisfrequenz, mit der ein Zustandsvektor bei vorrückender Zeit im Hilbertraum rotiert.

Natürlich wollen wir das alles in diesem Text anhand vieler Beispiele illustrieren. Gewissermaßen als Krönung wollen wir den Kontakt zur klassischen Mechanik herstellen, indem wir zeigen, wie potentielle Energie als *komplexe innere Kreisbewegung an einem Raumpunkt* sich in reale Bewegung eines Teilchenortes verwandeln kann, also in klassische kinetische Energie. Dabei wird sich zeigen, daß reale Bewegung stets eine Überlagerung von Zustandsvektoren mit geringfügig *verschiedenen* Energien erfordert.

2 Drehungen und die komplexe e -Funktion

Energie hat also etwas mit dem Rotieren von Vektoren in einem abstrakten Raum zu tun; andererseits wird alle Dynamik, auch schon in der klassischen Physik, durch Energie bestimmt. Daher ist es zweckmäßig, zunächst Drehungen formal in den Griff zu bekommen.

Im einfachsten Fall findet das Rotieren im 2-dimensionalen reellen Vektorraum statt. Ein Vektor, der sich mit konstanter Winkelgeschwindigkeit ω im Laufe der Zeit t dreht, ist

$$(R \cos \omega t, R \sin \omega t)$$

Das Symbol R kann etwa geometrisch die Länge des rotierenden Vektors sein. Es kann aber auch etwas ganz Anderes sein, denn das Rotieren als solches steckt im Sinus- und Kosinusfaktor. In der Quantenmechanik ist R selbst wieder ein (Zustands-)Vektor. Um zu vermeiden, daß wir nun Vektoren von Vektoren zu bilden haben⁴, machen wir uns die mathematische Tatsache zunutze, daß sich 2-dimensionale Drehungen wie *Zahlen* verhalten; allerdings wie komplexe Zahlen. Wir können den rotierenden Vektor als folgende komplexe Zahl auffassen:

$$R \cos \omega t + i R \sin \omega t = (\cos \omega t + i \sin \omega t) R$$

Darin ist i die imaginäre Einheit, mit der man wie mit einer unbestimmten reellen Zahl algebraisch rechnen kann, und für die zusätzlich $i^2 = -1$ gilt. Das Symbol R wird nun schlicht mit einer (komplexen) Zahl multipliziert und nicht mehr in einen Vektor eingebaut.

Die Vereinfachung geht aber noch weiter; die Kombination von Sinus und Kosinus wie oben gibt nämlich nach der Eulerschen Formel wieder eine einzelne, elementare Funktion, die (komplexe) Exponentialfunktion:

$$\cos \alpha + i \sin \alpha = e^{i\alpha}$$

In unserem speziellen Fall wäre $\alpha = \omega t$ der *Phasenwinkel* der Kreisbewegung. In der Physik bezeichnet man $e^{i\alpha}$ auch als Phasenfaktor.

Die Eulersche Formel ermöglicht es uns, einige günstige rechnerische Eigenschaften der e -Funktion für rotierende Vektoren zu nutzen.

⁴Man *könnte* die Quantenmechanik so formulieren und dadurch mit reellen Zahlen auskommen; es würde aber alle Dimensionen verdoppeln und auch in vieler anderer Hinsicht die mathematische Handhabung sehr erschweren.

2.1 Additionstheorem

Das Additionstheorem für die Exponentialfunktion besagt, daß eine Summe im Exponenten dasselbe ergibt wie ein Produkt von zwei Exponentialfunktionen:

$$e^{x+y} = e^x e^y \quad \text{für beliebige komplexe } x, y$$

Angewandt auf Drehungen, d.h. auf den Fall rein imaginärer Exponenten, bedeutet das zum Beispiel

$$e^{i(\omega t + \varphi)} = e^{i\omega t} e^{i\varphi}$$

Eine Phasenverschiebung bei der Drehbewegung (Verschiebungswinkel φ) ist also gleichbedeutend mit einem komplexen Zahlenfaktor $e^{i\varphi}$.

2.2 Ableitungsgesetz

Die e -Funktion hat auch eine besonders einfache Ableitung:

$$\frac{d}{dx} e^x = e^x$$

Zusammen mit der Kettenregel, die ebenfalls im Komplexen gilt, folgt daraus eine Gleichung von zentraler Bedeutung für die Quantenphysik:

$$-i \frac{d}{dt} e^{i\omega t} = \omega e^{i\omega t}$$

Wenn wir nämlich auf beiden Seiten mit dem zeitlich konstanten Symbol R multiplizieren, erhalten wir die *Vorform einer Schrödinger-Gleichung*:

$$-i \frac{d}{dt} (e^{i\omega t} R) = \omega (e^{i\omega t} R)$$

In unseren quantenmechanischen Anwendungen wird R ein Zustandsvektor mit der symbolischen Bezeichnung $|Z\rangle$ sein.

3 Stationäre Systeme und die Energie

Betrachten wir zunächst ein System, bei dem keinerlei meßbare Veränderungen stattfinden; man bezeichnet es als *stationäres* System. Es zeigt den quantenmechanischen Energiebegriff in Reinkultur.

Axiom 1 besagt, daß der Zustand eines Systems durch einen Vektor in einem abstrakten Vektorraum dargestellt wird. Hat man durch Messung an dem System zum Zeitpunkt t die Eigenschaft M bestimmt, so schreibt man für den Zustandsvektor $|M, t\rangle$.

Wodurch unterscheiden sich nun die Vektoren $|M, t\rangle$ für verschiedene t , wenn sich doch an den meßbaren Eigenschaften des Systems nichts ändert? Im *Heisenbergbild*⁵ der Quantenmechanik wird diese Frage so beantwortet: In jedem Anfangs-Zustands-Vektor $|M, 0\rangle$ sind alle zeitlich folgenden Zustandsvektoren $|M, t\rangle$ bereits *enthalten*. Und zwar so, wie Vektoren in anderen Vektoren enthalten sein können: als Summanden mit Vorfaktoren (Linearkombinationen). Beim stationären System tritt nur *ein* Summand auf. Sein Vorfaktor hängt außer von der verstrichenen Zeit t noch von der *Energie* E des Systems ab⁶:

$$|M, 0\rangle = e^{-iEt/\hbar} |M, t\rangle \quad (3.1)$$

Wählt man den Zeitpunkt $t = 0$ als Bezugspunkt, so vollführt der Vorfaktor in der komplexen Zahlenebene eine Kreisbewegung, deren Winkelgeschwindigkeit ω nach der Planckschen Formel mit der Energie zusammenhängt: $\omega = E/\hbar$. Damit haben wir nun unser Axiom 2 präzise gefaßt.

Gleichung (3.1) gibt den Zustandsvektor $|M, t\rangle$ für beliebige Zeiten t an. Die normale Problemstellung bei allen Systemen mit echter Dynamik ist aber, daß man zunächst nur das Verhalten während eines infinitesimal kurzen Zeitschrittes angeben kann. Ein mathematischer Ausdruck für die Veränderung eines (Zustands-)Vektors zwischen t und $t + dt$ ist die zeitliche Ableitung:

$$\frac{d}{dt} |M, t\rangle = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{|M, t + dt\rangle - |M, t\rangle}{dt} \quad (3.2)$$

⁵Fortgeschrittene werden erkennen, daß die $|M, t\rangle$ Eigenzustände des Operators $\hat{M}(t) = e^{iHt} \hat{M}(0) e^{-iHt}$ sind. Es gilt also $|M, t\rangle = e^{iHt} |M, 0\rangle$. Die Sichtweise des Heisenbergbildes wird sich später bei der Herleitung der Schrödingergleichung bewähren.

⁶Die Aussage ist als Grenzfall zu verstehen. In realistischen Anwendungen gibt es immer eine kleine Beimischung von anderen Zustandsvektoren, auf welche sich die Energie und der Phasenfaktor beziehen.

Die *Schrödingergleichung* besagt, wie ein Zustandsvektor seine eigene Zeitableitung bestimmt. Daraus muß die Entwicklung über einen längeren Zeitraum erst berechnet werden; normalerweise sind auch Energien zunächst nicht bekannt.

Natürlich fragen wir nun nach der Schrödingergleichung, die unserem besonders einfachen stationären System zugrundeliegt. Wenn wir beide Seiten von (3.1) nach t ableiten, gibt die linke Seite null; die rechte gibt nach der Produktregel zwei Terme, von denen sich einer vereinfachen läßt. Es bleibt⁷

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |M, t\rangle = E |M, t\rangle \quad (3.3)$$

Betrachten wir im Detail, was Gleichung (3.3) über die infinitesimale Zeitentwicklung des stationären Systems besagt. Der Zustands-*Vektor*, der einem gleichbleibenden Meßwert M entspricht, *ändert* sich mit der Zeit, denn die Zeitableitung ist ja nicht null. In der Änderungsgeschwindigkeit kommt die Energie des Zustandes zum Ausdruck. Der veränderte Vektor, den wir nach einem kurzen Zeitschritt erhalten, ist gemäß Gleichungen (3.2) und (3.3)

$$|M, t + dt\rangle = |M, t\rangle + i dt \frac{E}{\hbar} |M, t\rangle$$

Der Vektor zum Zeitpunkt t bekommt also beim Zeitschritt dt noch einen kleinen imaginären Teil von sich selbst hinzu. Man sieht auch, warum es ein *imaginärer* Teil sein muß, denn nur dies führt zu der Kreisbewegung in der komplexen Zahlenebene. Interessanterweise ist ein “Laufen im Kreis” geradezu sinnbildlich für einen Vorgang, der trotz innerer Bewegung zu keinen sichtbaren Veränderungen führt!

Für spätere Anwendungen halten wir fest, daß (3.1) eine Lösung der Differentialgleichung (3.3) ist. Es läßt sich auch zeigen, daß es nur diese eine Lösung gibt, wenn der Anfangszustand zur Zeit $t = 0$ auf $|M, 0\rangle$ festgelegt wird.

⁷Es handelt sich hier um die Entwicklung von zeitabhängigen Basisvektoren, nicht um eine Zeitentwicklung im Schrödingerbild; vgl. Fußnote 5. Das Schrödingerbild wird später bei der Wellenfunktion automatisch zum Vorschein kommen.

4 Unendlich schwerer Massenpunkt

Ein unendlich schwerer Massenpunkt, der sich an einem Ort x befindet, verharrt dort wegen $m = \infty$ in einem stationären Zustand mit einer rein potentiellen⁸ Energie $V(x)$. In der klassischen Mechanik kann er jedoch Impuls aufnehmen, und zwar nach dem Newtonschen Gesetz

$$\dot{p} = F$$

wobei F die Kraft auf den Massenpunkt ist. Mit dieser Kraft und der daraus folgenden Impulsübertragung verbindet sich nun in der Quantenmechanik eine geometrische Vorstellung. Im einfachsten Fall ist die Kraft konstant, was einem Potential

$$V(x) = -Fx$$

entspricht. Das bedeutet eine *differentielle*, von Ort zu Ort verschiedene Rotation der Phasenfaktoren vor den Zustandsvektoren:

$$|x, 0\rangle = e^{ixFt/\hbar} |x, t\rangle$$

Die unmittelbare Folge ist ein *Anwachsen der Phasendifferenz* zwischen verschiedenen Orten. Ist $e^{i\phi}$ der Phasenfaktor, so ist

$$\Delta\phi = \frac{Ft}{\hbar}\Delta x \quad (4.1)$$

die Phasendifferenz zwischen Orten im Abstand Δx . Sie kann natürlich nur zur Geltung kommen, wenn sich das Teilchen in einem Überlagerungszustand befindet, an dem mehrere Orten beteiligt sind; auf die "Stärke" der Beteiligungen kommt es allerdings bei $m = \infty$ nicht so sehr an.

Klassisch ist $Ft = p$ der Impuls des Massenpunktes, nachdem die Kraft über eine Zeit t gewirkt hat. Daher liegt es nahe, den quantenmechanischen Impuls über (4.1) zu *definieren*:

$$p = \hbar \frac{\Delta\phi}{\Delta x} \quad (4.2)$$

Ist umgekehrt der Impuls in dieser Form schon bekannt, so gibt (4.1) eine quantenmechanische Erklärung für das Newtonsche Gesetz bei $m = \infty$. In Abschnitt 7.2 werden wir sehen, wie bei endlicher Masse der Impuls (4.2) mit einer Geschwindigkeit zusammenhängt.

⁸... weil die kinetische Energie $p^2/2m$ für $m = \infty$ verschwindet ...

5 Chemische Bindung am Beispiel H_2^+

Der Begriff Zustands-*Vektor* beinhaltet auch, daß es einen Sinn hat, eine *Summe* von Zustandsvektoren zu bilden. Dies führt zum quantenmechanischen Phänomen der *Überlagerungszustände*. Es ist von eminenter praktischer Bedeutung, denn es sind beispielsweise alle organisch-chemischen Bindungen Überlagerungszustände.

Betrachten wir das einfachst-mögliche Molekül, oder besser Molekül-Ion, H_2^+ . Es besteht aus zwei Wasserstoffkernen (Protonen) und einem Elektron und ist somit insgesamt positiv geladen. Da wir uns hier nur für den Überlagerungseffekt als solchen interessieren, und nicht etwa für die genaue Form des Moleküls, können wir eine drastische Näherung machen. Wir nehmen an, daß unser Beobachtungsgerät nur gerade unterscheiden kann, ob sich das Elektron in der Nähe von Proton 1 oder in der Nähe von Proton 2 befindet. Dies möge durch die Zustands-Vektoren $|1, t\rangle$ bzw. $|2, t\rangle$ beschrieben werden. In Wirklichkeit kann ein Molekül auch in einem angeregten Quantenzustand sein; unsere Näherung läuft darauf hinaus, anzunehmen, daß das Molekül weder durch eine Temperatur noch durch unser Beobachtungsverfahren in einen angeregten Zustand versetzt wird.

Das Verhalten des Elektrons in unserem H_2^+ -System wird nun davon abhängen, wie weit die beiden Protonen voneinander entfernt sind. Nennen wir den Abstand zwischen den Protonen r und betrachten wir zunächst den Extremfall $r \rightarrow \infty$. Wenn das Elektron im Zustand $|1, t\rangle$ vorgefunden wird, sich also in der Nähe von Proton 1 aufhält, und wenn sich gleichzeitig Proton 2 "hinter dem Mond" befindet, dann ist es äußerst unwahrscheinlich, daß das Elektron jemals das andere Proton findet; wir können unter diesen Umständen den Zustand $|1, t\rangle$ als eingefroren betrachten und in Analogie zu Abschnitt 3 für $r \rightarrow \infty$ davon ausgehen, daß die Schrödingergleichung

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |1, t\rangle = E |1, t\rangle \quad (5.1)$$

gilt. Dabei ist E die Energie des Elektrons im Zustand $|1\rangle$. Vergewärtigen wir uns, was diese Gleichung besagt: Der Zustands-*Vektor* $|1, t\rangle$ ändert sich mit der Zeit, weil ja die Ableitung nach der Zeit nicht null ist; aber die Änderung ist nur ein Vielfaches des Vektors selbst. Als Lösung der Gleichung ergibt sich deswegen auch wieder nur ein Vielfaches von $|1, t\rangle$, nämlich ein Ausdruck wie in Gleichung (3.1).

Nun unterscheidet sich aber Proton 2 in nichts von Proton 1, daher muß auch der Elektronenzustand $|2, t\rangle$ eingefroren sein, wenn das Elektron zunächst in der Nähe von Proton 2 vorgefunden wird; außerdem muß seine Energie dieselbe sein wie in Zustand $|1, t\rangle$. Also gilt auch

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |2, t\rangle = E |2, t\rangle \quad (5.2)$$

Denken wir uns nun den Abstand r immer weiter verringert. Irgendwann können dann $|1, t\rangle$ und $|2, t\rangle$ nicht mehr als eingefroren angesehen werden, denn im Grenzfall $r = 0$ sind ja die beiden Zustände physikalisch nicht einmal mehr zu unterscheiden; es hat in diesem Limes gar keinen Sinn mehr zu sagen, daß das Elektron etwa ständig bei Proton 1 ist. Wenn nun weder $r = 0$ noch $r = \infty$ ist, befinden wir uns zwischen den Extremen und erwarten, daß ein Elektron von Proton 1 auch zu Proton 2 gelangen kann. Wie könnte eine quantitative Beschreibung solcher Übergänge aussehen? In unseren Schrödingergleichungen deutet sich dazu eine sehr einfache *Möglichkeit* an. Jeder der beiden Zustände könnte im Laufe der Zeit den anderen Zustand beigemischt bekommen, in der Weise, daß zu dem Zustandsvektor ein kleiner Teil von dem jeweils anderen Vektor addiert wird. Ausgedrückt durch die zeitlichen Änderungen hieße das

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |1, t\rangle = E |1, t\rangle + \kappa |2, t\rangle \quad (5.3)$$

Die Konstante κ nennt man auch *Hüpfparameter*. Dieselbe physikalische Situation liegt vor, wenn die Protonen 1 und 2 ausgetauscht werden, also muß auch gelten

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |2, t\rangle = E |2, t\rangle + \kappa |1, t\rangle \quad (5.4)$$

In unserer einfachen Näherung können wir κ nicht zahlenmäßig festlegen, aber wir erkennen die formale Struktur, mit der Übergänge zwischen Quantenzuständen beschrieben werden können. Die Gleichungen (5.3) und (5.4) erheben wir kurzerhand zu einem neuen Axiom. Mit diesem reduziert sich ein Übergangsprozeß auf das Addieren von (Zustands-)Vektoren; die mathematische Struktur könnte kaum einfacher sein⁹.

⁹Die Mathematik von verallgemeinerten Vektoren, d.h. die Lineare Algebra, gilt als die einfachste mathematische Disziplin. Es gibt nämlich für jede Problemstellung, die die Voraussetzung der Linearität erfüllt, prinzipiell ein Lösungsverfahren.

Wir können das Gleichungssystem aus (5.3) und (5.4) mit einem einfachen Trick lösen. Bilden wir nämlich Summe und Differenz der beiden Zustandsvektoren, also die *Superpositionen* bzw. *Überlagerungen*

$$|+, t\rangle = |1, t\rangle + |2, t\rangle \quad (5.5)$$

$$|-, t\rangle = |1, t\rangle - |2, t\rangle \quad (5.6)$$

so erhalten wir für die beiden neuen Vektoren $|\pm, t\rangle$ jeweils wieder eine Gleichung vom Typ (3.3):

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d}{dt} |+, t\rangle &= (E + \kappa) |+, t\rangle = E_+ |+, t\rangle \\ -i\hbar \frac{d}{dt} |-, t\rangle &= (E - \kappa) |-, t\rangle = E_- |-, t\rangle \end{aligned}$$

Die Lösungen erhält man analog zu (3.1):

$$|+, t\rangle = e^{iE_+ t/\hbar} |+, 0\rangle \quad (5.7)$$

$$|-, t\rangle = e^{iE_- t/\hbar} |-, 0\rangle \quad (5.8)$$

Das Ergebnis dieser einfachen Rechnung ist physikalisch sehr aufschlußreich. Es sind nun die Überlagerungsvektoren, bei denen ein Phasen-Vorfaktor rotiert und sich sonst mit der Zeit nichts ändert. Diese Zustände sind also nach der Planckschen Formel (1.1) wieder durch eine exakte Energie gekennzeichnet. Aber die Energien haben sich *durch den Hüpfprozeß verschoben!* Im Zustand $|+\rangle$ hat das Elektron eine um κ höhere Energie als ursprünglich ohne Hüpfen im Zustand $|1\rangle$ oder $|2\rangle$. Im Zustand $|-\rangle$ ist das Energie-Niveau durch das Hüpfen um κ abgesenkt. In diesen Zustand kann also das H_2^+ -Molekül mit einem Energiegewinn von $\Delta E = \kappa$ übergehen, wenn die Protonen aus einem großen Abstand näher zusammenrücken. Somit handelt es sich bei $|-\rangle$ um den *Bindungszustand* des H_2^+ -Moleküls.

Verfolgen wir nun die zeitliche Entwicklung eines Zustands, der *nicht* zu scharfer Energie gehört. Betrachten wir zum Beispiel den Zustand $|1, 0\rangle$, bei dem sich das Elektron zum Zeitpunkt $t = 0$ bei Proton 1 befindet. Wollen wir die Eigenschaften des Elektrons zu einem späteren Zeitpunkt t wissen, so müssen wir $|1, 0\rangle$ durch Zustände ausdrücken, die eine Information über den Zeitpunkt t beinhalten, also durch $|1, t\rangle$ und $|2, t\rangle$. Zunächst folgt aus (5.5) und (5.6) die Darstellung

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{2} |+, 0\rangle + \frac{1}{2} |-, 0\rangle$$

In diese Gleichung können wir einsetzen, was wir durch Auflösen von (5.7) und (5.8) bekommen, nämlich

$$\begin{aligned} |+, 0\rangle &= e^{-iE_+t/\hbar} |+, t\rangle \\ |-, 0\rangle &= e^{-iE_-t/\hbar} |-, t\rangle \end{aligned}$$

Darin sind $|+, t\rangle$ und $|-, t\rangle$ nach den Definitionen (5.5) und (5.6) wieder Überlagerungen von $|1, t\rangle$ und $|2, t\rangle$, deren Vorfaktoren wir nun noch mit Hilfe der Eulerschen Formel zusammenfassen müssen. Das gewünschte Ergebnis ist

$$|1, 0\rangle = e^{-iEt/\hbar} \cos(\kappa t/\hbar) |1, t\rangle - ie^{-iEt/\hbar} \sin(\kappa t/\hbar) |2, t\rangle$$

Wie wir sehen, bildet sich aus dem Anfangszustand “Elektron bei Proton 1” für $t > 0$ zunächst ein Überlagerungszustand aus $|1, t\rangle$ und $|2, t\rangle$, den wir uns höchstens “verschwommen” vorstellen können. Zur Zeit $t = \pi\hbar/2\kappa$ hat sich aber $|1, 0\rangle$ vollständig in $|2, t\rangle$ verwandelt, weil dann der Kosinus null und der Sinus eins ist. Das Elektron, das ursprünglich in der Nähe von Proton 1 war, ist nach dieser Zeit definitiv in der Nähe von Proton 2. Nach der doppelten Zeit, $t = \pi\hbar/\kappa$, ist das Elektron wieder zu Proton 1 zurückgekehrt. Dieses Hin und Her wiederholt sich mit der Periode $\pi\hbar/\kappa$, also umso langsamer, je kleiner der Hüpfparameter ist. Charakteristisch ist auch, daß erst durch Überlagerung von Zustandsvektoren mit verschiedenen Energien ($E_+ \neq E_-$) eine Bewegung im realen Raum entsteht.

Analog zu $|1, 0\rangle$ entwickelt sich der Anfangszustand $|2, 0\rangle$ wie folgt:

$$|2, 0\rangle = e^{-iEt/\hbar} \cos(\kappa t/\hbar) |2, t\rangle + ie^{-iEt/\hbar} \sin(\kappa t/\hbar) |1, t\rangle$$

Bis auf das andere Vorzeichen vor dem zweiten Term sind lediglich die Rollen der beiden Protonen vertauscht.

6 Wahrscheinlichkeit von Meßergebnissen

Häufig kann man sich bei einem Quantensystem ganz bestimmte Zustände gut vorstellen; das waren beim H_2^+ -Molekül etwa die Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$. Dann sind aber Überlagerungszustände wie $|1\rangle + |2\rangle$ völlig unanschaulich, weil in diesen Zuständen das Elektron keinen klar definierten Aufenthaltsort hat. Man kann aber selbst in einem Überlagerungszustand den Aufenthaltsort eines Elektrons *messen*, indem man entsprechende Detektoren aufstellt. Welches Ergebnis ist nun zu erwarten, wenn das Elektron zum Zeitpunkt der Ortsmessung nicht in einem scharfen Ortszustand ist?

Wenn die Art der Messung und der Quantenzustand nicht zueinander passen (Normalfall!) so ist das Ergebnis einer Einzelmessung nicht vorhersehbar.

Die Quantenmechanik macht aber stets genaue Vorhersagen über die Statistik einer *Meßreihe*, bei der das Experiment mit der Einzelmessung unendlich oft wiederholt wird. Zum Beispiel kann man aus den Zustandsvektoren berechnen, mit welcher *Wahrscheinlichkeit* zur Zeit t der Teilchenort 1 oder 2 gemessen wird. Dies erfordert allerdings den Begriff des *Skalarprodukts von Vektoren*. Dabei handelt es sich um eine komplexe Zahl, die jedem Paar von Vektoren im Hilbert-Raum automatisch mitgegeben ist. Sind $|Z_1\rangle$ und $|Z_2\rangle$ irgendwelche Vektoren, so bezeichnet $\langle Z_1|Z_2\rangle$ dieses Skalarprodukt. Die Rechenregeln dafür sind einfach und werden in den Anwendungsbeispielen klarwerden. Aus einem Grund, der ebenfalls gleich klarwerden wird, funktioniert die Wahrscheinlichkeitsrechnung nur mit *normierten* Zustandsvektoren, d.h. mit solchen, die die Zusatzbedingung $\langle Z|Z\rangle = 1$ erfüllen.

Axiom 4: Ist der Zustandsvektor $|Z_1\rangle$ präpariert worden, und ist $|Z_2\rangle$ der Zustandsvektor, der einem bestimmten Meßergebnis entspricht, so ist $W = |\langle Z_1|Z_2\rangle|^2$ die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Meßergebnisses.

In der Normierungsbedingung $\langle Z|Z\rangle = 1$ kommt zum Ausdruck, daß ein Zustand stets mit Sicherheit in sich selbst vorgefunden wird, also mit $W = 1$. Eine weitere Folge aus dem Axiom ist:

Sind m_1 und m_2 verschiedene mögliche Ergebnisse einer Messung, so sind die entsprechenden Zustandsvektoren orthogonal, d.h. es ist $\langle m_1|m_2\rangle = 0$.

Wenn diese Bedingung nicht erfüllt wäre, so hätten wir es mit einem unbrauchbaren Meßgerät zu tun; ein Zustand, der durch den Meßwert m_1

vollständig bestimmt sein sollte, würde dann ja mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit auch den Meßwert m_2 liefern.

Im Beispiel des H_2^+ -Moleküls hatten wir als mögliche Meßergebnisse zum Zeitpunkt t die beiden Fälle “Elektron bei Proton 1” und “Elektron bei Proton 2”. Es gilt also, wenn wir auch die Normierung noch einmal hinschreiben,

$$\langle 1, t|1, t \rangle = 1 \quad \langle 2, t|2, t \rangle = 1 \quad \langle 1, t|2, t \rangle = 0 \quad (6.1)$$

Die Meßergebnisse 1 und 2 schließen sich aber nicht aus, wenn sie zu *verschiedenen* Zeiten t und t' gewonnen werden, weil das Elektron dann ja Gelegenheit gehabt hat, zu Hüpfen; also brauchen die entsprechenden Zustandsvektoren auch nicht orthogonal zu sein:

$$\langle 1, t|2, t' \rangle \neq 0 \quad \text{für } t \neq t'$$

Nehmen wir an, daß zum Zeitpunkt $t = 0$ das Elektron bei Proton 1 war. Wir haben also den Zustand $|1, 0\rangle$ präpariert. Zum Zeitpunkt t stellen wir durch Messung fest, ob sich das Elektron wieder bei Proton 1 aufhält. Der Zustandsvektor, der diesem Meßergebnis entspricht, ist $|1, t\rangle$. Mit Hilfe von (5) und (6.1) erhalten wir zunächst das Skalarprodukt

$$\begin{aligned} \langle 1, 0|1, t \rangle &= \langle 1, 0| \left[e^{iEt/\hbar} \cos(\kappa t/\hbar) |1, 0\rangle + ie^{iEt/\hbar} \sin(\kappa t/\hbar) |2, 0\rangle \right] \\ &= e^{iEt/\hbar} \cos(\kappa t/\hbar) \langle 1, 0|1, 0\rangle + ie^{iEt/\hbar} \sin(\kappa t/\hbar) \langle 1, 0|2, 0\rangle \\ &= e^{iEt/\hbar} \cos(\kappa t/\hbar) \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron zur Zeit t bei Proton 1 zu finden, ist also

$$W_1(t) = |\langle 1, 0|1, t \rangle|^2 = \cos^2(\kappa t/\hbar)$$

Völlig analog können wir die Wahrscheinlichkeit dafür berechnen, daß sich das Elektron zur Zeit t bei Proton 2 aufhält, wenn es bei $t = 0$ bei Proton 1 war. Das relevante Skalarprodukt ist

$$\langle 1, 0|2, t \rangle = ie^{iEt/\hbar} \sin(\kappa t/\hbar)$$

so daß die Wahrscheinlichkeit

$$W_2(t) = |\langle 1, 0|2, t \rangle|^2 = \sin^2(\kappa t/\hbar)$$

ist. Zu den speziellen Zeiten, die wir im vorigen Abschnitt schon betrachtet haben, ist das Meßergebnis wieder eindeutig. Das Elektron ist mit Sicherheit bei Proton 1 für $t = 0, \pi\hbar/\kappa, 2\pi\hbar/\kappa, \dots$ weil zu diesen Zeiten $W_1(t) = 1$ gilt. Es ist mit Sicherheit *nicht* bei Proton 1 für $t = \frac{1}{2}\pi\hbar/\kappa, \frac{3}{2}\pi\hbar/\kappa, \dots$ weil zu diesen Zeiten $W_1(t) = 0$ gilt. Anders als im vorigen Abschnitt können wir nun aber aufgrund von Axiom 4 auch Aussagen über Meßergebnisse zu den Zwischenzeiten machen; es sind allerdings nur statistische Aussagen über ∞ -fache Wiederholungen einer Einzelmessung.

Wie wir sahen, sind Zustandsvektoren mit verschiedenen Meßwerten zum selben Zeitpunkt stets orthogonal. Wie wollen an dieser Stelle eine zwar unanschauliche, aber mathematisch sehr vorteilhafte Folgerung aus einer solchen Orthogonalität von Zustandsvektoren erwähnen. Es seien ganz allgemein die Vektoren $|n, t\rangle$ mit einem abzählbaren, aber sonst beliebigen Index n paarweise orthogonal und normiert; es soll also gelten

$$\langle n, t | n', t \rangle = 0 \text{ für } n \neq n' \quad \text{und} \quad \langle n, t | n, t \rangle = 1$$

Wenn sich dann im Verlauf einer Rechnung ergeben sollte, daß eine bestimmte Überlagerung $\sum_n \lambda_n |n, t\rangle$ gleich dem *Nullvektor* ist, so kann man daraus mathematisch schließen, daß alle Koeffizienten λ_n einzeln null sein müssen:

$$\sum_n \lambda_n |n, t\rangle = 0 \quad \implies \quad \lambda_n = 0 \text{ für alle } n \quad (6.2)$$

Der Beweis ist eine Standardübung in der Linearen Algebra. Man bildet auf beiden Seiten das Skalarprodukt mit einem der Vektoren, etwa mit $|n_0, t\rangle$. Auf der rechten Seite gibt das Skalarprodukt mit dem Nullvektor null. Auf der linken Seite benutzt man eine allgemeine Rechenregel, nach welcher das Skalarprodukt mit einer Summe dasselbe gibt wie die Summe der einzelnen Skalarprodukte. Also hier:

$$\langle n_0, t | \sum_n \lambda_n |n, t\rangle = \sum_n \lambda_n \langle n_0, t | n, t \rangle$$

Wegen der Orthogonalität ist $\langle n_0, t | n, t \rangle = 0$ außer im Fall $n = n_0$. Also bleibt nur ein Term in der Summe übrig, nämlich $\lambda_{n_0} \langle n_0, t | n_0, t \rangle$. Dieser Term ist gleich λ_{n_0} , weil $|n_0, t\rangle$ normiert ist. Also bleibt nur $\lambda_{n_0} = 0$, und das für einen *beliebigen* Index n_0 .

7 Quantenteilchen in 1 Dimension

Spricht ein Detektor auf ein Teilchen an, so hat man den *Teilchenort* mit der Genauigkeit des Detektorvolumens gemessen. Im Gegensatz zur klassischen Mechanik gilt nun

Axiom 5: *Quantenmechanisch ist der Zustand eines (spinlosen) Teilchens schon durch genaue Ortsmessung zu einem Zeitpunkt vollständig bestimmt.*

Es liegt nahe, 1-dimensionale Bewegungen dadurch zu beobachten, daß man Detektoren mit Nummern $-\infty < n < \infty$ in gleichmäßigem Abstand a längs einer Geraden aufstellt. Wenn wir das Teilchen zur Zeit t im Detektor n gesehen haben, bezeichnen wir den entsprechenden Zustandsvektor mit $|n, t\rangle$.

7.1 Hüpf-Terme und die Kinetische Energie

Wir erwarten, daß das Teilchen von einem Detektor in den nächsten wandern wird. Wie könnte sich diese Bewegung in den Zustandsvektoren zeigen? In Analogie zum “Hüpfen” des Elektrons im H_2^+ -Molekül (siehe Gln. (5.3) und (5.4)) könnte der Zustandsvektor $|n, t\rangle$ im Verlauf der Zeit eine Beimischung von den beiden Nachbar-Zustandsvektoren $|n+1, t\rangle$ und $|n-1, t\rangle$ bekommen:

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |n, t\rangle = V |n, t\rangle + \kappa |n+1, t\rangle + \kappa |n-1, t\rangle \quad (7.1)$$

Dabei ist der Parameter κ für das Hüpfen nach rechts und links derselbe; denn nach Axiom 5 ist der Teilchenzustand schon durch Ortsmessung zu *einem* Zeitpunkt t bestimmt, enthält also keinerlei Information über Bewegungsrichtungen oder gar Geschwindigkeiten. Damit kann es auch keine Vorzugsrichtung für das Hüpfen geben. Diese einfachen Überlegungen haben, wie wir in Abschnitt 7.2 sehen werden, eine sehr konkrete Konsequenz:

Aus dem symmetrischen Hüpfen zu den nächsten Nachbarn folgt die Energie-Impuls-Beziehung $E_{\text{kin}} = p^2/2m$ mit der Teilchenmasse $m = -\hbar^2/2\kappa a^2$.



Wir haben an allen Orten dasselbe V und κ angenommen. Kein Ort ist also vor einem anderen ausgezeichnet. Folglich kann es auch keine Bereiche geben,

zu denen das Teilchen hingezogen oder von denen es abgestoßen wird. Somit beschreibt Gleichung (7.1) ein *kräftefreies* Teilchen.

Nach dem Superpositionsprinzip (Zustandsvektoren!) sind beliebige Überlagerungen von Ortszuständen möglich. Nehmen wir an, daß sich ein solcher Überlagerungszustand zur Zeit $t = 0$ gebildet hat. Die Zahlenkoeffizienten, mit denen die Ortszustände $|n, 0\rangle$ in die Überlagerung eingehen, schreiben wir als $\psi(n, 0)$. Somit haben wir

$$|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi(n, 0) |n, 0\rangle \quad (7.2)$$

Nun sind aber die Ortszustände $|n, t\rangle$ einer späteren Zeit t in den Anfangszuständen $|n, 0\rangle$ bereits vektoriell enthalten. Wir haben das in den bisherigen Beispielen schon benutzt, wollen es aber anhand von Gleichung (7.1) noch einmal diskutieren. Da wir uns normalerweise für die Entwicklung in positiver Zeitrichtung interessieren¹⁰, schreiben wir die Zeitableitung hier in der Form

$$\frac{d}{dt}f(t) = \lim_{dt \rightarrow 0} \frac{f(t) - f(t - dt)}{dt}$$

Multiplizieren wir dann (7.1) mit dem Zeitschritt dt durch, so erhalten wir

$$|n, t - dt\rangle = |n, t\rangle - \frac{i}{\hbar} dt (V |n, t\rangle + \kappa |n + 1, t\rangle + \kappa |n - 1, t\rangle)$$

Der Ortszustand zum früheren Zeitpunkt $t - dt$ ist also eine Überlagerung der Ortszustände zum nächsten Zeitpunkt, diese wieder eine (kompliziertere) Überlagerung der Ortszustände zum übernächsten Zeitpunkt, und so weiter. Somit ist der Anfangs-Zustandsvektor (7.2) zu *jedem* Zeitpunkt t eine Überlagerung der jeweiligen $|n, t\rangle$. Schreiben wir die entsprechenden Überlagerungskoeffizienten als $\psi(n, t)$, so haben wir

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi(n, 0) |n, 0\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi(n, t) |n, t\rangle \quad (7.3)$$

Für $\psi(n, t)$ gilt nun die *Schrödingergleichung der Wellenfunktion*. Zur Herleitung der Gleichung wenden wir die Zeitableitung mit dem Vorfaktor $-i\hbar$ auf

¹⁰Es gibt in der Quantenmechanik keinen prinzipiellen Unterschied zwischen vorwärts- und rückwärtslaufender Zeit.

(7.3) an und benutzen die Produktregel für die einzelnen Terme. Es ergibt sich zunächst

$$0 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ \left(-i\hbar \frac{d}{dt} \psi(n, t) \right) |n, t\rangle + \psi(n, t) \left(-i\hbar \frac{d}{dt} |n, t\rangle \right) \right\}$$

Für die Zeitableitung der Ortszustände im zweiten Term können wir (7.1) einsetzen. In der entstehenden Summe fassen wir zunächst alle Terme mit demselben Ortszustand zusammen. Das Hüpfen zeigt sich dann in den Indizes der Vorfaktoren; zum Beispiel ist

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi(n, t) |n+1, t\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \psi(n-1, t) |n, t\rangle$$

weil beide Summen, wenn man sie ausschreibt, dieselben Summanden enthalten. Ausklammern von gemeinsamen Zustandsvektoren ergibt nun

$$0 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(-i\hbar \frac{d}{dt} \psi(n, t) + V \psi(n, t) + \kappa \psi(n-1, t) + \kappa \psi(n+1, t) \right) |n, t\rangle$$

Der Klammerausdruck muß für jedes einzelne n null sein; diese Art von Schlußfolgerung haben wir in (6.2) ganz allgemein besprochen. Also gilt

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(n, t) = \kappa \psi(n+1, t) + \kappa \psi(n-1, t) + V \psi(n, t) \quad (7.4)$$

Das ist eine Differentialgleichung bezüglich der Zeit und eine Differenzgleichung bezüglich des Teilchenortes. Um insgesamt die Schrödinger'sche Differentialgleichung zu bekommen, müssen wir nur noch den Grenzfall betrachten, in dem der Abstand a zwischen benachbarten Detektoren gegen null geht. Zunächst stellen wir fest, daß die Detektornummer n und die Ortskoordinate x über die Beziehung

$$x = n a$$

miteinander zusammenhängen. In diesem Sinne läßt sich $\psi(n, t)$ auch als $\psi(x, t)$ schreiben, und Gleichung (7.4) in der Form

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = \kappa \psi(x+a, t) + \kappa \psi(x-a, t) + V \psi(x, t) \quad (7.5)$$

Diese Gleichung enthält für $a \rightarrow 0$ eine zweite Ableitung nach dem Teilchenort. Um das zu sehen, schreiben wir für die zweite Ableitung einer Funktion zunächst allgemein $f''(x) = \lim_{a \rightarrow 0} (f'(x + \frac{1}{2}a) - f'(x - \frac{1}{2}a))/a$ und drücken darin die ersten Ableitungen durch die Differenzen $f(x + a) - f(x)$ bzw. $f(x) - f(x - a)$ aus; auf diese Weise erhalten wir

$$f''(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{f(x + a) + f(x - a) - 2f(x)}{a^2}$$

Um einen solchen Ausdruck in Gleichung (7.5) wiederzufinden, braucht man nur die Hüpfsterme um $-2\kappa\psi(x, t)$ zu ergänzen und die Ergänzung vom Energieterm wieder abzuziehen; außerdem muß man mit a^2 erweitern. Aus (7.5) wird damit

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = a^2 \kappa \frac{\psi(x + a) + \psi(x - a) - 2\psi(x)}{a^2} + (V + 2\kappa)\psi(x) \quad (7.6)$$

Wir müssen nun über die Parameter V und κ verfügen, die ja bisher in keiner Weise festgelegt waren. Zum einen können wir den Energie-Nullpunkt festlegen, indem wir

$$V = -2\kappa \quad (7.7)$$

setzen. Außerdem können wir $a^2\kappa$ durch eine andere, ebenfalls unbestimmte Zahl m ausdrücken (deren Vorzeichen wir unten diskutieren):

$$a^2\kappa = -\frac{\hbar^2}{2m} \quad (7.8)$$

Im Limes $a \rightarrow 0$ müssen wir Ableitungen nach der Zeit und nach dem Ort auseinanderhalten, also partielle Ableitungen verwenden. Das ergibt schließlich die *zeitabhängige kräftefreie Schrödingergleichung*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \quad (7.9)$$

Wir werden bei der Diskussion von Gleichung (7.14) sehen, daß der Parameter m als Masse des Teilchens identifiziert werden kann. Damit sollte $m > 0$ sein, was für den Hüpfparameter die Einschränkung $\kappa < 0$ bedeutet. Wir treffen hier aber nur eine Wahl, die die "Natur" uns freistellt. Für $\kappa < 0$ werden alle kinetischen Energien positiv, für $\kappa > 0$ werden sie alle negativ; es ist nur eine Konvention, sich für positive kinetische Energien zu entscheiden.

7.2 Impuls und Geschwindigkeit

Die einfachsten Lösungen von Gleichung (7.9) sind sogenannte *ebene*¹¹ *Wellen*

$$\psi(x, t) = \exp \frac{i}{\hbar}(px - Et) \quad \text{mit } E = \frac{p^2}{2m} \quad (7.10)$$

Der Parameter p ist dabei eine beliebige reelle Zahl. Wenn es nur darauf ankäme, die Differentialgleichung zu lösen, wenn es also keine Randbedingungen gäbe, könnte p sogar komplex sein. Wir wollen hier ohne nähere Begründung konstatieren, daß für komplexes p die Wellenfunktion in einer der Richtungen $x \rightarrow \pm\infty$ unendlich groß werden würde, und daß sich infolgedessen das Teilchen *nur* im Unendlichen aufhalten würde. Das ist nicht die Situation, die uns physikalisch interessiert; also wählen wir p reell.

An der Beziehung zwischen E und dem Parameter p in Gleichung (7.10) fällt auf, daß sie gerade so ist, als ob E die kinetische Energie und p der Impuls der Lösung wäre. Beides sollte, jedenfalls nach den klassischen Vorstellungen, in einer räumlichen Bewegung des Teilchens mit Geschwindigkeit $v = p/m$ zum Ausdruck kommen. Das ist auch der Fall, allerdings auf eine sehr unklassische Weise. Zunächst betonen wir, daß die Schrödingergleichung eine *lineare* Gleichung für die Wellenfunktion ist, so daß aus bereits gewonnenen Lösungen, etwa $\psi_1(x, t)$ und $\psi_2(x, t)$, stets weitere Lösungen in der Form von Überlagerungen $\psi(x, t) = A\psi_1(x, t) + B\psi_2(x, t)$ folgen.

Räumliche Bewegung entsteht erst bei Überlagerung von ebenen Wellen mit verschiedenen Impulsen p , also bei insgesamt unscharfem Impuls.

Um den Effekt zu demonstrieren, reichen schon zwei überlagerte Wellen mit geringfügig verschiedenen Impulsen p_1 und p_2 . Die Energien zu diesen Impulsen liegen nach Gleichung (7.10) zwar fest, aber es lohnt sich, zunächst allgemein E_1 und E_2 zu schreiben. Am einfachsten ist es, die Überlagerung mit dem Minuszeichen zu betrachten:

$$\psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(p_1x - E_1t)} - e^{\frac{i}{\hbar}(p_2x - E_2t)} \quad (7.11)$$

Diese Wellenfunktion ist jedenfalls dort null, wo die beiden Exponenten übereinstimmen, also für $p_1x - E_1t = p_2x - E_2t$ oder, anders geschrieben,

$$x = \frac{E_1 - E_2}{p_1 - p_2} t \quad =: \quad x_0(t)$$

¹¹Die analogen Lösungen in 3 Dimensionen haben ebene Flächen konstanter Phase.

An dem Ort $x_0(t)$ hält sich das Teilchen zur Zeit t garantiert *nicht* auf. Denn in der Überlagerung $\sum_x \psi(x, t) |x, t\rangle$ hat der Ortszustand $|x_0, t\rangle$ den Vorfaktor $\psi(x_0, t) = 0$, daher *fehlt* dieser Ort in dem Überlagerungszustand.

Die beiden Exponentialfunktionen in (7.11) sind auch dort gleich, wo sich die Exponenten nur um ganzzahlige Vielfache von 2π unterscheiden. Daraus ergibt sich als vollständige Liste der Nullstellen von (7.11)

$$x_n(t) = \frac{E_1 - E_2}{p_1 - p_2} t + \frac{2\pi\hbar}{p_1 - p_2} n \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7.12)$$

Alle diese Orte $x_n(t)$ bewegen sich gleichförmig mit der Geschwindigkeit $v = \Delta E / \Delta p$. Im Limes $p_1 \rightarrow p_2$ erhalten wir

$$v = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp} \frac{p^2}{2m} = \frac{p}{m} \quad (7.13)$$

Plausiblerweise liegt der Aufenthaltsort des Teilchens *zwischen* den Orten, wo es sich nicht aufhält; also muß sich auch der Aufenthaltsort selbst mit $v = p/m$ bewegen.

Wir können jetzt begründen, warum wir m als Masse und p als Impuls bezeichnet haben. Aus (7.10) und (7.13) folgt ja

$$E = \frac{1}{2}mv^2 \quad (7.14)$$

Darin ist E die Energie aufgrund von Axiom 2. Die Größe v haben wir soeben geometrisch als Teilchengeschwindigkeit identifiziert. In Analogie zur klassischen Struktur von kinetischer Energie wird man also $m = 2E/v^2$ als Masse des Teilchens *definieren*, und $p = mv$ als den Impuls.

In der Wellenfunktion (7.10) hängt nur der Faktor $e^{-iEt/\hbar}$ von der Zeit ab. Damit handelt es sich um eine *stationäre* Überlagerung von Ortszuständen, wie wir nun zeigen wollen. Schreiben wir zunächst die Gleichung (7.3) für den vorliegenden Spezialfall hin, wobei wir wieder $x = na$ benutzen:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ipna/\hbar} |n, 0\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(pna - Et)/\hbar} |n, t\rangle \quad (7.15)$$

Auf beiden Seiten sind die Ortszustände so überlagert, daß zwischen Nachbarorten überall dieselbe und von der Zeit unabhängige Phasenverschiebung besteht:

$$\psi(n+1, t) = e^{ipa} \psi(n, t) \quad (7.16)$$

Führen wir für eine solche Überlagerung das Symbol

$$|p, t\rangle := \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{ipna/\hbar} |n, t\rangle \quad (7.17)$$

ein, so nimmt Gleichung (7.15) folgende Form an:

$$|p, 0\rangle = e^{-iEt/\hbar} |p, t\rangle$$

Das ist gerade die Beziehung zwischen einem Anfangszustand und einem Folgezustand, wie sie für ein stationäres System mit der Energie E charakteristisch war; siehe Gleichung (3.1). Dem Meßwert M entspricht hier eine konkrete quantenmechanische Struktur, nämlich das Bildungsgesetz (7.16). Es ist durch den Zustands¹²parameter p und damit physikalisch durch den Impuls charakterisiert. Daher werden die Überlagerungszustände (7.17) auch als *Impulszustände* bezeichnet.

7.3 Bemerkungen zum Gaußschen Wellenpaket

Die kräftefreie zeitabhängige Schrödingergleichung (7.9) hat außer den ebenen Wellen noch einen weiteren Typ von exponentiellen Lösungen. Es empfiehlt sich, zur Vorbereitung eine vereinfachte Differentialgleichung zu betrachten:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \quad (7.18)$$

Wie man durch Differenzieren nachrechnen kann, gibt es dazu die folgende spezielle Lösung:

$$\psi_A(x, t) = t^{-1/2} \exp(x^2/t)$$

Hieraus kann man durch Substitutionen von x und t das Gaußsche Wellenpaket entwickeln. Die richtigen Koeffizienten der Schrödingergleichung erhält man bereits für die modifizierte Funktion

$$\psi_B(x, t) = \psi_A(x, 2\hbar t/im)$$

denn aus der Kettenregel für die Zeitableitung und aus Gleichung (7.18) für die Funktion ψ_A folgt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_B(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_B(x, t)$$

¹²Der Detektorabstand a ist kein Parameter des Zustandes, sondern der Meßapparatur.

Da es sich bei dieser Gleichung um eine Beziehung zwischen Ableitungen handelt, bleibt sie auch gültig, wenn man in einem dritten Schritt die Variablen x und t um komplexe Konstanten ξ und τ verschiebt:

$$\psi_C(x, t) = \psi_B(x - \xi, t - \tau)$$

Die Verschiebungen haben eine physikalische Bedeutung, die sich *a posteriori* nachprüfen läßt; wir nehmen sie hier mit der folgenden Schreibweise schon vorweg:

$$\tau = t_0 + \frac{i}{\hbar} m \sigma^2 \qquad \xi = x_0 + \frac{i}{\hbar} p_0 \sigma^2$$

Durch die komplexe Verschiebung in der Zeit erhält die Wellenfunktion zum reellen Zeitpunkt t_0 eine endliche reelle Breite σ . Durch die komplexe Verschiebung im Ort verlagert sich der Schwerpunkt der Wellenfunktion räumlich nach x_0 und im Impulsraum nach p_0 .

7.4 Potentielle Energie

“Potentiell” ist diejenige Energie, die ein Teilchen aufgrund der Tatsache hat, daß es sich an einem bestimmten Ort befindet. Zum Beispiel hat ein 1-dimensionales Elektron am Ort x in einem konstanten elektrischen Feld \mathcal{E} die potentielle Energie $V(x) = e\mathcal{E}x$.

Wenn wir in der diskreten Schrödingergleichung (7.1) die Hüpfsterme abschalten, indem wir $\kappa = 0$ oder $m = \infty$ setzen, so werden die Ortszustände einzeln stationär. Das Teilchen hat dann an seinem jeweiligen Aufenthaltsort *nur* eine potentielle Energie, d.h. es ist $V = E$. Diese Energie kann, zum Beispiel durch Einschalten eines elektrischen Feldes, vom Ort $x = na$ abhängig gemacht werden. Folglich gilt für das unendlich schwere Teilchen die Schrödingergleichung

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |n, t\rangle = V(n) |n, t\rangle \qquad (m = \infty)$$

Wenn wir nun die Hüpfsterme in der *vorherigen* Form wieder einschalten (was wir sogleich diskutieren werden) so erhalten wir

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |n, t\rangle = V(n) |n, t\rangle + \kappa |n + 1, t\rangle + \kappa |n - 1, t\rangle \qquad (7.19)$$

Wie in Abschnitt 7.1 gewinnt man hieraus den Kontinuumlimes $a \rightarrow 0$. Es muß lediglich zum bisherigen, konstant-divergenten Anteil (7.7) der potentiellen Energie noch ein räumlich variabler, endlicher Anteil $U(x) \equiv U(n)$ hinzugefügt werden:

$$V(n) = -2\kappa + U(n)$$

Das Ergebnis ist die allgemeine *zeitabhängige Schrödingergleichung*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + U(x) \psi(x, t) \quad (7.20)$$

Wie wir gesehen haben, entspricht die Struktur des Potentialterms dem generellen Ausdruck für quantenmechanische Energie durch eine Differentialgleichung in t , nur daß diese Energie hier einem bestimmten Ort zugeordnet ist. Die Ableitungsstruktur des kinetischen Terms resultiert aus einem “symmetrischen Hüpfen” zu den Nachbarorten.

Weshalb haben wir nun angenommen, daß der Hüpfparameter κ nicht von der potentiellen Energie beeinflußt wird? Tatsächlich haben wir damit nur den physikalischen Anwendungsbereich von Gleichung (7.20) genauer bestimmt. Wie wir in einem späteren “fortgeschrittenen” Kapitel besprechen wollen, kann sehr wohl auch der Hüpfparameter von Ort zu Ort variieren, und zwar ganz allgemein *als komplexe Zahl* $\kappa = |\kappa|e^{i\phi}$. Wenn dabei nur der Phasenfaktor $e^{i\phi}$ ortsabhängig wird, so entspricht das physikalisch einem zugeschalteten Magnetfeld. Eine räumliche Variation des Betrages $|\kappa|$ bewirkt einen Zusatzterm in der potentiellen Energie¹³. Im allgemeinen Fall treten diese Effekte natürlich zusammen auf.

¹³Wahrscheinlich ist es ein Gravitationspotential, das zu einem elektrostatischen Potential hinzukommt; die physikalische Deutung dieses Terms ist noch in Arbeit.

8 Anschlußbedingungen

Zur Vereinfachung betrachtet man in der Quantenmechanik auch potentielle Energien $U(x)$, die sich an einzelnen Stellen sprunghaft ändern. Zum Beispiel haben Elektronen im Innern eines Metallstücks ein niedrigeres Potential U als außerhalb, wobei der Übergangsbereich die äußere Schicht von Atomrümpfen ist. Diese Schicht ist extrem dünn im Verhältnis zum Metallstück.



Nun ist die Schrödingergleichung an den Sprungstellen eines Potentials problematisch, weil dort die 2. Ableitung der Wellenfunktion gerade *aufgrund* der Gleichung nicht eindeutig definiert sein kann. Das Problem tritt nicht auf, wenn wir nur diskrete Aufenthaltsorte $x = na$ für ein Teilchen zulassen; denn dann gibt es keinen Unterschied zwischen stetigen, n -mal differenzierbaren oder völlig beliebigen Wellenfunktionen. Gehen wir also wieder zu der diskretisierten Schrödingergleichung (7.4) zurück und untersuchen wir, wie sich die Wellenfunktion an einer Potentialsprungstelle x_0 verhält! Das Ergebnis wird sein, daß auf beiden Seiten von x_0 sowohl die Funktionswerte als auch die Ableitungen der Wellenfunktion übereinstimmen müssen:

$$\psi(x_0)_{\text{links}} = \psi(x_0)_{\text{rechts}} \quad (8.1)$$

$$\psi'(x_0)_{\text{links}} = \psi'(x_0)_{\text{rechts}} \quad (8.2)$$

Lösungstechnisch bedeutet das sogar nur *eine* Anschlußbedingung:

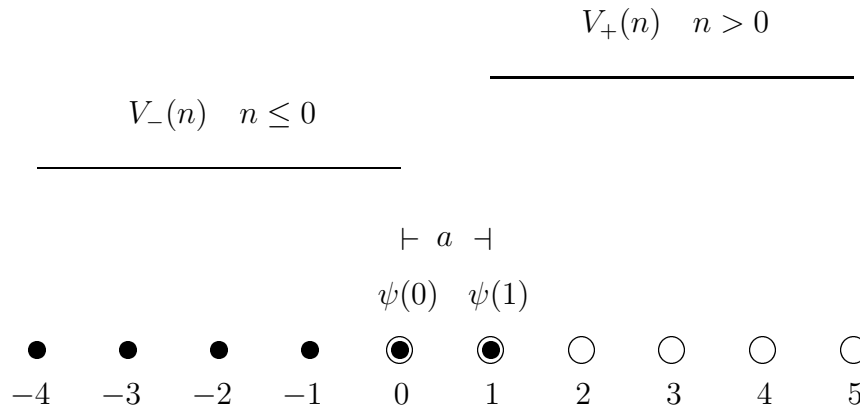
$$\frac{\psi'(x_0)_{\text{links}}}{\psi(x_0)_{\text{links}}} = \frac{\psi'(x_0)_{\text{rechts}}}{\psi(x_0)_{\text{rechts}}} \quad (8.3)$$

Weil nämlich die Schrödingergleichung linear ist, kann man links oder rechts von der Sprungstelle die Wellenfunktion mit einer beliebigen Zahl multiplizieren und auf diese Weise immer erreichen, daß entweder Funktionswerte oder Ableitungen auf beiden Seiten gleich sind. Ist damit (8.1) oder (8.2) erfüllt, so ergibt sich aus (8.3) auch die jeweils fehlende Bedingung.

Zur Begründung von (8.1) und (8.2) gehen wir von der diskretisierten Schrödingergleichung für eine Wellenfunktion mit Energie E aus:

$$\kappa \psi(n+1) + \kappa \psi(n-1) + V(n) \psi(n) = E \psi(n) \quad (8.4)$$

Wir können diese Gleichung nach $\psi(n+1)$ auflösen; dieses ist also durch die beiden linken Nachbarwerte $\psi(n-1)$ und $\psi(n)$ zusammen mit $V(n)$ bereits festgelegt. Die Abbildung zeigt, was das an der Sprungstelle bedeutet.



Im Bereich $n \leq 0$ ist die Potentialfunktion $V_-(n)$. Von links her bestimmt es die Wellenfunktion *bis hin zu* $\psi(1)$.

Um die Wellenfunktion vom Bereich $n > 0$ her zu verfolgen, lösen wir Gleichung (8.4) nach $\psi(n-1)$ auf; dieses ist nun durch die beiden rechten Nachbarwerte $\psi(n+1)$ und $\psi(n)$ zusammen mit $V(n)$ festgelegt. Die Potentialfunktion $V_+(n)$ bestimmt die Wellenfunktion *bis hin zu* $\psi(0)$.

Die Funktionswerte $\psi(0)$ und $\psi(1)$ gehören also beiden Potentialbereichen gemeinsam an. Als Teile einer Gesamtlösung müssen ψ_{links} und ψ_{rechts} daher in den Werten $\psi(0)$ und $\psi(1)$ übereinstimmen. Eine gleichwertige Bedingung ist, daß sie in den folgenden Kombinationen übereinstimmen:

$$\frac{\psi(1) + \psi(0)}{2} \quad \text{und} \quad \frac{\psi(1) - \psi(0)}{a}$$

Im Limes $a \rightarrow 0$ werden daraus Funktionswert und Ableitung der Wellenfunktion, und es ergeben sich die Anschlußbedingungen (8.1) und (8.2).

9 Tunneleffekt an der Rechteck-Barriere

In der klassischen Mechanik kann die kinetische Energie eines Teilchens nur positiv sein; Bereiche mit einer Gesamtenergie $E < V(x)$ sind für klassische Teilchen verboten. Hingegen kann ein quantenmechanisches Teilchen durch solche Bereiche hindurch “tunneln”. Dieser Effekt läßt sich rechnerisch am einfachsten bei einem rechteckigen Potentialverlauf studieren. Betrachten wir also eine Potential-Barriere der Dicke D und der konstanten Höhe $V_0 > 0$:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x \in [0, D] \\ 0 & x \notin [0, D] \end{cases} \quad (9.1)$$

Die stationäre Schrödingergleichung ist

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{mit } V(x) \text{ gemäß (9.1)}$$

In den Bereichen $x \leq 0$ und $x \geq D$ ist das die freie Schrödingergleichung mit den Basislösungen

$$e^{ipx} \text{ und } e^{-ipx} \quad p = \sqrt{2mE} \quad (9.2)$$

Im Barrierenbereich $0 < x < D$ ist $V(x)$ zwar nicht null, aber es ist konstant und kann daher rechnerisch der Energie E zugeschlagen werden. Wir setzen also $E' = E - V_0$ und haben mit diesem Argument sofort auch im Barrierenbereich zwei Basislösungen zur Verfügung, nämlich

$$e^{ip'x} \text{ und } e^{-ip'x} \quad p' = \sqrt{2m(E - V_0)} \quad (9.3)$$

Im Energiebereich $0 < E < V_0$ ist der Impuls p' imaginär, was klassisch keinen Sinn hat, wohl aber quantenmechanisch für eine Wellenfunktion.

9.1 Nebenbedingung beim Tunneleffekt

Die Schrödingergleichung beschreibt alle Situationen, die bei einem Teilchen mit dem Potentialverlauf $V(x)$ vorkommen können. Das Teilchen kann zum Beispiel von rechts ($x > D$) anfliegen und mit der Barriere wechselwirken; ebensogut kann es von links ($x < 0$) kommen. Auch Überlagerungen dieser beiden Alternativen sind Lösungen der Schrödingergleichung. Wir müssen die uns interessierende physikalische Situation also genauer definieren.

Beim Tunneleffekt fliegt das Teilchen von einer Seite auf die Barriere zu, und es interessiert die Wahrscheinlichkeit, mit der es auf die andere, klassisch verbotene Seite gelangt. Auf letzterer Seite wird sich das Teilchen stets von der Barriere *weg* bewegen, was eine Nebenbedingung für die *Richtung* des Impulses in diesem Bereich bedeutet. Nehmen wir an, daß das Teilchen aus dem Bereich $x \geq D$ angefliegen kommt. Dann soll im Bereich $x \leq 0$ der Impuls in die negative x -Richtung weisen. Von den beiden Basisfunktionen (9.2) hat e^{ipx} einen nach rechts und e^{-ipx} einen nach links gerichteten Impuls; die Wellenfunktion darf also im Bereich $x \leq 0$ nur die Basisfunktion e^{-ipx} enthalten und muß damit von der Form

$$\psi(x) = c_{\text{trans}} e^{-ipx} \quad \text{im Bereich } x < 0 \quad (9.4)$$

sein. Der Zahlenkoeffizient c_{trans} ist noch frei. Um die weitere Diskussion übersichtlicher zu gestalten, setzen wir zunächst

$$c_{\text{trans}} = 1 \quad (\text{vorläufig}) \quad (9.5)$$

und geben damit der zu konstruierenden Lösung der Schrödingergleichung eine vorläufige “technische” Normierung. Später werden wir, um die Tunnelwahrscheinlichkeit zu ermitteln, die gewonnene Gesamtlösung neu normieren. Mit der vorläufigen Setzung (9.5) haben wir am Austrittspunkt der Barriere bei $x = 0$ die folgenden Werte für die Wellenfunktion und ihre Ableitung:

$$\psi(0) = 1 \quad \psi'(0) = -ip \quad (9.6)$$

Wir halten fest, daß der Funktionswert reell und die Ableitung imaginär ist.

9.2 Wellenfunktion im Innern der Barriere

Die Wellenmechanik des Tunneleffekts spielt sich vor allem im Innern der Potentialbarriere ab. Wir diskutieren hier nur den klassisch verbotenen Fall mit $E' < 0$. Der Impuls p' ist dann rein imaginär, $p' = iq$, und die Basislösungen (9.3) sind in Wirklichkeit reelle Exponentialfunktionen

$$e^{-qx} \quad \text{und} \quad e^{qx} \quad \text{mit} \quad q = \sqrt{2m(V_0 - E)} \quad (9.7)$$

Diese beiden Funktionen müssen nun so überlagert werden, daß sie bei $x = 0$ die Vorgaben der Gleichung (9.6) erfüllen. Dazu ist es am einfachsten,

zunächst die beiden Überlagerungen $\cosh qx = \frac{1}{2}e^{qx} + \frac{1}{2}e^{-qx}$ und $\sinh qx = \frac{1}{2}e^{qx} - \frac{1}{2}e^{-qx}$ zu bilden. Am Punkt $x = 0$ trägt nämlich der *cosinus hyperbolicus* nur zum Funktionswert und nicht zur Ableitung bei, während umgekehrt der *sinus hyperbolicus* nur zur Ableitung und nicht zum Funktionswert beiträgt. Wie die Probe zeigt, ist ganz allgemein

$$\psi(0) \cosh qx + \psi'(0) \frac{1}{q} \sinh qx$$

diejenige Überlagerung von e^{-qx} und e^{qx} , die bei $x = 0$ einen vorgegebenen Funktionswert $\psi(0)$ und eine vorgegebene Ableitung $\psi'(0)$ hat. Mit den konkreten Vorgaben (9.6) erhalten wir also im Innern der Potentialbarriere die Lösungsfunktion

$$\psi(x) = \cosh qx - \frac{ip}{q} \sinh qx \quad \text{im Bereich } 0 < x < D \quad (9.8)$$

Schon an dieser Stelle ist zu sehen, daß der Tunneleffekt *exponentiell klein* sein wird. Denn $\cosh qx$ und $\sinh qx$ verhalten sich für große Argumente wie $e^{qx}/2$, so daß Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion (9.8) innerhalb der Barriere von $x = 0$ nach $x = D$ stark anwachsen. Da unser Teilchen von $x > D$ her kommt, ist die Dichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(x)|^2$ auf der Ankunftsseite sehr viel größer als auf der Tunnelseite.

9.3 Tunnelwahrscheinlichkeit

Um die genaue Tunnelwahrscheinlichkeit zu erhalten, müssen wir allerdings die Lösungsfunktion noch im Bereich $x > D$ berechnen. Aus (9.8) erhalten wir Funktionswert und Ableitung an der Anschlußstelle $x = D$:

$$\psi(D) = \cosh qD - \frac{ip}{q} \sinh qD \quad \psi'(D) = q \sinh qD - ip \cosh qD$$

Zur Fortsetzung von $\psi(x)$ in den Bereich $x > D$ sind jetzt die Basislösungen $\cos p(x - D)$ und $\sin p(x - D)$ zweckmäßiger als e^{ipx} und e^{-ipx} . Der Vorteil ist auch hier wieder, daß bei $x = D$ der Cosinus nur zum Funktionswert und der Sinus nur zur Ableitung beiträgt, so daß wir die Lösungsfunktion mit vorgegebenen Randbedingungen sofort hinschreiben können:

$$\psi(x) = \psi(D) \cos p(x - D) + \psi'(D) \frac{1}{p} \sin p(x - D) \quad p = \sqrt{2mE/\hbar^2}$$

In unserem konkreten Fall führt das zunächst auf

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \left(\cosh qD - \frac{ip}{q} \sinh qD \right) \cos p(x - D) + \\ & + \frac{1}{p} \left(q \sinh qD - ip \cosh qD \right) \sin p(x - D) \end{aligned}$$

Für die physikalische Interpretation müssen wir nun noch $\cos p(x - D)$ und $\sin p(x - D)$ mit Hilfe der Eulerschen Formel in ebene Wellen zerlegen. Nach unserer Vorgabe kommt das Teilchen von rechts; das entspricht einem Anteil proportional zu e^{-ipx} in der Wellenfunktion, den wir als einlaufenden Anteil bezeichnen. Der Anteil proportional zu e^{ipx} läuft im Bereich $x > D$ von der Barriere weg; dies entspricht dem Fall, daß das Teilchen an der Barriere reflektiert wird. Unsere oben gewonnene Überlagerung von einlaufender und reflektierter Welle ist

$$\psi(x) = c_{\text{einl}} e^{-ipx} + c_{\text{refl}} e^{ipx} \quad \text{im Bereich } x > D \quad (9.9)$$

mit

$$c_{\text{einl}} = \left(\cosh qD + \frac{i}{2} \left(\frac{q}{p} - \frac{p}{q} \right) \sinh qD \right) e^{ipD}$$

und

$$c_{\text{refl}} = +\frac{1}{2i} \left(\frac{q}{p} + \frac{p}{q} \right) \sinh qD e^{-ipD}$$

Wenn wir die Wellenfunktion auf der linken Seite der Barriere analog schreiben und e^{-ipx} dort als transmittierte Wellen bezeichnen, so kommt noch die Gleichung

$$\psi(x) = c_{\text{trans}} e^{-ipx} \quad \text{mit} \quad c_{\text{trans}} = 1 \quad \text{im Bereich } x < 0$$

hinzu. Als Maß für die quantenmechanische Durchlässigkeit der Barriere kann nun das Verhältnis der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten in der einlaufenden und der transmittierten Welle dienen; dementsprechend definiert man den *Transmissionskoeffizienten* als $T = |c_{\text{trans}}|^2 / |c_{\text{einl}}|^2$. Nach unserer Rechnung ergibt sich für die rechteckige Potentialbarriere, wenn man noch $\cosh^2 x = 1 + \sinh^2 x$ benutzt,

$$T = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{q}{p} + \frac{p}{q} \right)^2 \sinh^2 qD}$$

Analog definiert man den *Reflexionskoeffizienten* als $R = |c_{\text{refl}}|^2 / |c_{\text{einl}}|^2$. Durch Nachrechnen findet man $R + T = 1$; dies läßt sich dahingehend interpretieren, daß sich das Teilchen *nach* der Wechselwirkung mit der Barriere entweder in der transmittierten oder in der reflektierten Welle befinden muß. Um diese Interpretation zu rechtfertigen, muß man jedoch aus unseren Wellenfunktionen mit scharfer Energie zunächst durch Überlagerung Wellenpakete mit unscharfer Energie bilden und deren zeitliche Entwicklung verfolgen. Dabei zeigt sich tatsächlich ein einzelnes einlaufendes Wellenpaket, das sich nach dem Stoß an der Barriere in ein reflektiertes und ein transmittiertes Wellenpaket aufspaltet.

In den Anwendungen des Tunneleffektes gilt typischerweise $qD \gg 1$. Aus dem $\sinh qD$ im Transmissionskoeffizienten wird dann $e^{qD}/2$, und dieser Exponentialfaktor hängt viel empfindlicher von den Parametern p und q ab als die übrigen, algebraischen Faktoren. Im wesentlichen gilt damit, wenn man p und q wieder durch die Energie ausdrückt,

$$T \approx \text{const} \times \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}D\right) \quad (9.10)$$

Die Tunnelwahrscheinlichkeit hängt also ab von der Teilchenmasse m , von der Barrierenhöhe V_0 über dem Energieniveau E , und von der Barrierendicke D . Alle diese Parameter stehen im *Exponenten*, was auf extreme Variationen der Tunnelwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von den Parametern hinausläuft. Aus diesem Grund variieren zum Beispiel beim α -Zerfall von radioaktiven Atomkernen die Halbwertszeiten von Bruchteilen von Sekunden bis zu Milliarden von Jahren, obwohl die Energiedifferenz $V_0 - E$ nur im Bereich einiger MeV und die Barrierendicke D nur im Bereich einiger Femtometer variiert.

Wichtig ist an (9.10) auch die Abhängigkeit von der Barrierendicke D . Setzt man nämlich zwei Barrieren gleicher Höhe aber mit unterschiedlichen Dicken zu $D = D_1 + D_2$ zusammen, so multiplizieren sich die Tunnelwahrscheinlichkeiten

$$T(D_1 + D_2) = T(D_1)T(D_2).$$

Unter Hinweis darauf nimmt man häufig an, daß sich Tunnelwahrscheinlichkeiten näherungsweise auch dann multiplizieren, wenn die Barrierenhöhen unterschiedlich sind.

9.4 Zusammenfassung

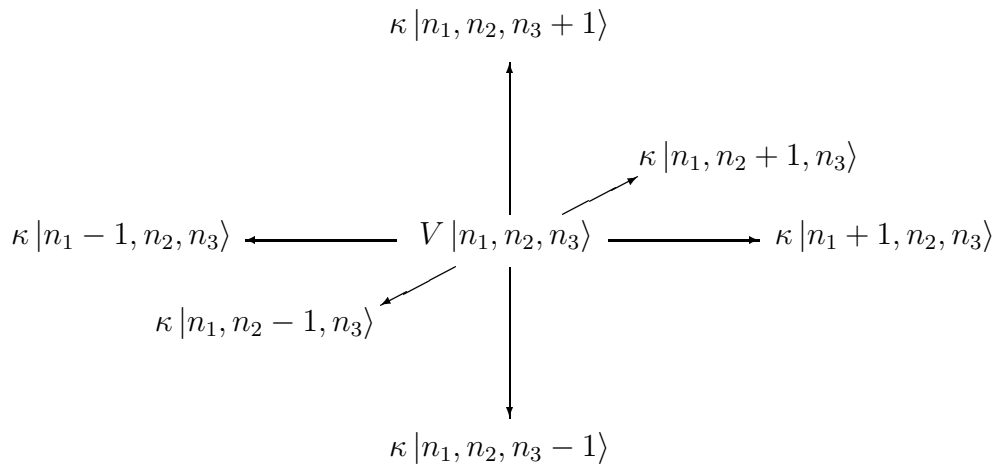
Wenn die Tunnelbarriere “hoch” und “dick” ist, führen die beiden exponentiellen Lösungen der Schrödingergleichung im Innern der Barriere zu extrem verschiedenen physikalischen Resultaten. Es kommt also für das Verständnis des Tunneleffekts wesentlich darauf an, zu sehen, warum immer jeweils die abschwächende Lösung die Hauptrolle spielt, während die verstärkende Lösung durch einen extrem kleinen Vorfaktor unterdrückt ist. Fassen wir die Argumente zusammen:

- Auf der *Austrittsseite* der Barriere ist nur eine weglaufernde Welle e^{-ipx} vorhanden.
- Damit sind dort Funktionswert und Ableitung als komplexe Zahlen um 90° phasenverschoben.
- Funktionswert und Ableitung multiplizieren sich innerhalb der Barriere mit den *reellen* Funktionen Cosh und Sinh; die Phasenverschiebung bleibt erhalten.
- Das ist analog zu der Situation, daß Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion wie Cosh und Sinh von der Austritts- zur Eintrittsseite hin exponentiell anwachsen.

10 Quantenteilchen in 3 Dimensionen

Bei der 1-dimensionalen Anordnung von Detektoren war es wichtig, überall denselben Detektorabstand a zu wählen. Aus Symmetriegründen war dann wenigstens beim freien Teilchen auch der Hüpfparameter κ überall gleich. Nur deshalb war es möglich, weitergehende Schlüsse zu ziehen und κ mit einer Teilchenmasse m in Verbindung zu bringen. Erst recht müssen wir nun in 3 Dimensionen darauf achten, daß uns die Symmetrie der Anordnung erlaubt, an allen Orten mit demselben Hüpfparameter auszukommen¹⁴. Die einfachste Möglichkeit ist eine Anordnung der Detektoren wie in einem kubischen Kristallgitter¹⁵.

Zweckmäßigerweise führen wir in einem 3-dimensionalen kubischen Gitter ein kartesisches Koordinatensystem ein, so daß die Position eines Detektors durch drei Nummern (n_1, n_2, n_3) beschrieben wird; sie durchlaufen unabhängig voneinander alle ganzen Zahlen von $-\infty$ bis $+\infty$. Wir wollen annehmen, daß das Teilchen in einem Zeitschritt vom Punkt (n_1, n_2, n_3) nur zu den sechs nächsten Nachbarn hüpfen kann:



¹⁴Diese Vorbetrachtung zur Symmetrie ist keineswegs ein Artefakt des diskretisierten Raumes. Sie erklärt vielmehr gerade, weshalb auch die Kanonische Quantisierung nur in kartesischen Koordinatensystemen funktioniert.

¹⁵Das Gitter muß nur invariant unter Translationen und unter Punktspiegelung sein. Die übrigen Eigenschaften, wie beispielsweise Winkel zwischen Kristallachsen oder die Anzahl der Gitterpunkte pro Einheitszelle, ändern nur den Zusammenhang zwischen der Masse und dem oder den Hüpfparameter(n).

In Analogie zu Gleichung (7.1) wird dann für einen Ortszustand $|n_1, n_2, n_3, t\rangle$ folgendes gelten:

$$\begin{aligned}
-i\hbar \frac{d}{dt} |n_1, n_2, n_3, t\rangle &= V |n_1, n_2, n_3, t\rangle + & (10.1) \\
&+ \kappa |n_1 + 1, n_2, n_3, t\rangle + \kappa |n_1 - 1, n_2, n_3, t\rangle \\
&+ \kappa |n_1, n_2 + 1, n_3, t\rangle + \kappa |n_1, n_2 - 1, n_3, t\rangle \\
&+ \kappa |n_1, n_2, n_3 + 1, t\rangle + \kappa |n_1, n_2, n_3 - 1, t\rangle
\end{aligned}$$

Bilden wir analog zu (7.3) eine allgemeine Überlagerung der Ortszustände

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1, n_2, n_3} \psi(n_1, n_2, n_3, t) |n_1, n_2, n_3, t\rangle$$

so folgt aus (10.1) zunächst wieder eine diskrete Schrödingergleichung

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \psi(n_1, n_2, n_3, t) &= V \psi(n_1, n_2, n_3, t) + \\
&+ \kappa \psi(n_1 + 1, n_2, n_3, t) + \kappa \psi(n_1 - 1, n_2, n_3, t) \\
&+ \kappa \psi(n_1, n_2 + 1, n_3, t) + \kappa \psi(n_1, n_2 - 1, n_3, t) \\
&+ \kappa \psi(n_1, n_2, n_3 + 1, t) + \kappa \psi(n_1, n_2, n_3 - 1, t)
\end{aligned}$$

Anstelle der Detektornummern können wir auch Ortskoordinaten benutzen:

$$x_1 = n_1 a \quad x_2 = n_2 a \quad x_3 = n_3 a \quad \psi(x_1, x_2, x_3, t) \equiv \psi(n_1, n_2, n_3, t)$$

Damit haben die Hüpfterme die Form $\kappa\psi(x_1+a, x_2, x_3, t) + \kappa\psi(x_1-a, x_2, x_3, t)$ in 1-Richtung und analog in 2- und 3-Richtung. Die Hüpfterme werden zu 2. Ableitungen in jeweils *einer* Raumrichtung¹⁶, wenn wir $V = -6\kappa + U$ setzen und die κ -Terme nach dem Muster von Gleichung (7.6) zu Differenzenquotienten zusammenfassen. Schließlich setzen wir wieder $\kappa = -\hbar^2/2ma^2$ und erhalten so im Kontinuuumlimites $a \rightarrow 0$ die *3-dimensionale zeitabhängige Schrödingergleichung* für $\psi \equiv \psi(x_1, x_2, x_3, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_3^2} \right) + U(x_1, x_2, x_3) \psi \quad (10.2)$$

Wie in Abschnitt 7.4 diskutiert, haben wir den Potentialanteil U hier wieder als ortsabhängig angenommen, den Hüpffparameter κ bzw. die Teilchenmasse m jedoch als konstant.

¹⁶... d.h. zu partiellen 2. Ableitungen nach x_1, x_2 oder $x_3 \dots$

11 Magnetfeld: Hüpfen mit Phasenverschiebung

Zur Herleitung der Schrödingergleichung haben wir bisher den Hüpfparameter κ als räumlich und zeitlich konstant angesehen. In diesem Abschnitt soll nun die physikalische Bedeutung eines variablen κ diskutiert werden. Allerdings wollen wir weiterhin κ und V als *zeitlich* konstant ansehen.

Auch von der Hüpfrichtung hängt κ im allgemeinen Fall ab. Die 6 Richtungen zu den nächsten Nachbarn auf dem 3-dimensionalen kubischen Gitter wollen wir mit $\mu = \pm 1, \pm 2, \pm 3$ bezeichnen; die Hüpfvektoren der Länge a in diesen Richtungen sollen mit $\vec{\mu}$ bezeichnet werden. Damit können wir eine vektorielle Kurzschreibweise für die Hüpfprozesse von Abschnitt 10 angeben. Von Gitterplatz \vec{x} (mit $\vec{x} = a\vec{n}$) gelangen wir in μ -Richtung zum Nachbarplatz $\vec{x} + \vec{\mu}$. Gehen wir also von folgender diskretisierter Schrödingergleichung aus:

$$-i\hbar \frac{d}{dt} |\vec{x}, t\rangle = V(\vec{x}) |\vec{x}, t\rangle + \sum_{\mu=-3}^3 \kappa(\vec{x}, \mu) |\vec{x} + \vec{\mu}, t\rangle \quad (11.1)$$

Es sind nun je zwei κ 's voneinander abhängig, wie man folgendermaßen sieht. Für das Skalarprodukt von "gleichzeitigen" Ortszuständen gilt

$$\langle \vec{x}, t | \vec{x}', t \rangle = \begin{cases} 1 & \vec{x} = \vec{x}' \\ 0 & \vec{x} \neq \vec{x}' \end{cases} \quad \text{unabhängig von } t \quad (11.2)$$

Wenn wir dies nach t differenzieren, so können wir links die Produktregel¹⁷ anwenden und erhalten rechts null. Für die Ableitung der einzelnen Faktoren können wir (11.1) einsetzen, wobei zu beachten ist, daß beim Übergang von $|\vec{x}, t\rangle$ zu $\langle \vec{x}, t|$ alle Vorfaktoren komplex zu konjugieren sind¹⁸. Auswertung mit Hilfe von (11.2) in den Fällen $\vec{x}' = \vec{x}$ und $\vec{x}' = \vec{x} + \vec{\mu}$ mit $\mu = -3, \dots, 3$ ergibt, daß alle $V(\vec{x})$ reelle Zahlen sein müssen, und daß

$$\kappa(\vec{x} - \vec{\mu}, \mu) = \overline{\kappa(\vec{x}, -\mu)} \quad \text{für alle } \vec{x} \text{ und } \mu \quad (11.3)$$

Dabei bedeutet \bar{z} allgemein die zu z komplex-konjugierte Zahl.

¹⁷Für Ableitungen von Produkten gilt $(f \bullet g)' = f' \bullet g + f \bullet g'$ weitgehend unabhängig von der Art der Faktoren f und g . Das Produkt $f \bullet g$ muß nur reell-linear in f und g sein. f und g können ganz unterschiedliche Objekte sein, wie etwa Matrix und Vektor oder Zeilenvektor und Spaltenvektor.

¹⁸Das ist eine allgemeine Eigenschaft des Skalarprodukts von Vektoren im Komplexen.

Analog zu Abschnitt 10 folgt aus (11.1) eine Gleichung für die Wellenfunktion. Mit Hilfe von (11.3) erhält man

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{x}, t) = V(\vec{x})\psi(\vec{x}, t) + \sum_{\mu=-3}^3 \overline{\kappa(\vec{x}, \mu)} \psi(\vec{x} + \vec{\mu}, t) \quad (11.4)$$

Auch hier verbirgt sich in den Hüpftermen wieder eine diskretisierte 2. Ableitung der Wellenfunktion. Es handelt sich um zwei nacheinander ausgeführte *kovariante Differenzen*. Fassen wir zunächst die Abweichungen vom homogenen Hüpfparameter in einem exponentiell geschriebenen Vorfaktor¹⁹ zusammen; dabei ist z zunächst ein beliebiges *komplexes* Zahlenfeld:

$$\overline{\kappa(\vec{x}, \mu)} = \kappa_0 e^{iaz(\vec{x}, \mu)} \quad \kappa_0 = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (11.5)$$

Die kovariante Differenz $D_\mu f$ einer beliebigen Funktion $f(\vec{x})$ ist definiert als

$$D_\mu f(\vec{x}) = e^{iaz(\vec{x}, \mu)} f(\vec{x} + \vec{\mu}) - f(\vec{x}) \quad (11.6)$$

D_μ und $D_{-\mu}$ sind wegen (11.3) zueinander adjungiert, $D_{-\mu} = D_\mu^\dagger$, denn es gilt

$$\sum_{\vec{x}} \overline{g(\vec{x})} D_\mu f(\vec{x}) = \sum_{\vec{x}} \overline{D_{-\mu} g(\vec{x})} f(\vec{x})$$

Bei Anwendungen auf die Wellenfunktion $\psi(\vec{x}, t)$ fungiert t nur als Parameter. Bildet man zunächst $D_\mu \psi$ und wendet auf diese neue Funktion noch einmal $D_{-\mu}$ an, so ergibt sich

$$\begin{aligned} D_{-\mu} D_\mu \psi(\vec{x}, t) &= -e^{iaz(\vec{x}, \mu)} \psi(\vec{x} + \vec{\mu}, t) - e^{iza(\vec{x}, -\mu)} \psi(\vec{x} - \vec{\mu}, t) \\ &+ \{1 + e^{iaz(\vec{x}, -\mu)} e^{iaz(\vec{x} - \vec{\mu}, \mu)}\} \psi(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

Aus Gleichung (11.4) wird damit nach ein paar Umstellungen

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(\vec{x}, t) = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \sum_{\mu=1}^3 D_\mu^\dagger D_\mu \psi(\vec{x}, t) + W(\vec{x})\psi(\vec{x}, t) \quad (11.7)$$

mit

$$W(\vec{x}) = V(\vec{x}) + 3\kappa_0 + \kappa_0 \sum_{\mu=1}^3 |e^{iaz(\vec{x}, -\mu)}|^2 \quad (11.8)$$

¹⁹Das a im Exponenten wird sich später als sinnvoll erweisen; man könnte es auch in das hier noch völlig allgemeine $z(\vec{x}, \mu)$ mit hineindefinieren.

Wenden wir uns nun dem Kontinuumlimes $a \rightarrow 0$ zu. Der Vorfaktor a^{-2} in Gleichung (11.7) verteilt sich auf die beiden kovarianten Differenzen. Wäre nun allein schon $a^{-1}D_\mu$ im Limes divergent, so wäre erst recht das Produkt $a^{-2}D_\mu^\dagger D_\mu$ divergent; denn wenn man $a^{-1}D_\mu$ und $a^{-1}D_\mu^\dagger$ als Matrizen darstellt (es sind ja lineare Abbildungen) so sind die Diagonalelemente von $a^{-2}D_\mu^\dagger D_\mu$ von der Form $s_i^\dagger s_i$ wobei s_i der i te Spaltenvektor von $a^{-1}D_\mu$ ist.

Damit bleibt die Bedingung auszuwerten, daß $a^{-1}D_\mu$ einen Limes für $a \rightarrow 0$ hat. Das Verfahren dazu ist aus der Gittereichtheorie bekannt. Wir entwickeln in Gleichung (11.6) die verschobene Wellenfunktion bis zur ersten Ordnung der Taylorreihe,

$$f(\vec{x} + \vec{\mu}) = f(\vec{x}) + a \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_\mu} + \mathcal{O}(a^2)$$

und entwickeln auch den Exponentialfaktor bis zur ersten Ordnung der Exponentialreihe. Das ergibt zunächst

$$a^{-1}D_\mu f(\vec{x}) = \frac{\partial}{\partial x_\mu} f(\vec{x}) + iz(\vec{x}, \mu) f(\vec{x}) + \mathcal{O}(a).$$

Wir stellen nun fest, daß es für den Kontinuumlimes nur darauf ankommt, daß das Zahlenfeld $z(\vec{x}, \mu)$ einen wohldefinierten Limes für $a \rightarrow 0$ hat, und daß wir im Hinblick auf den Limes nichts verlieren, wenn wir $z(\vec{x}, \mu)$ von Anfang an mit diesem Limes gleichsetzen. Aus diesem Grund haben wir auch $z(\vec{x}, \mu)$ und nicht $z(a, \vec{x}, \mu)$ geschrieben. Damit erhalten wir nun

$$\lim_{a \rightarrow 0} a^{-1}D_\mu f(\vec{x}) = \frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_\mu} + iz(\vec{x}, \mu) f(\vec{x})$$

Für die adjungierte kovariante Differenz erhalten wir analog

$$\lim_{a \rightarrow 0} a^{-1}D_\mu^\dagger f(\vec{x}) = -\frac{\partial f(\vec{x})}{\partial x_\mu} + \overline{iz(\vec{x}, \mu)} f(\vec{x}).$$

Diese Grenzwerte brauchen wir im Prinzip nur noch in Gleichung (11.7) einzusetzen, um die Kontinuums-Schrödingergleichung zu gewinnen. Dabei ergibt sich eine Vereinfachung, die man rein mathematisch nicht erwarten würde: Der Imaginärteil des z -Feldes fällt aus allen Ableitungstermen heraus und trägt nur in Form mehrerer Multiplikationsoperatoren, also in Form

von Potentialtermen, zur Schrödingergleichung bei. Aus dem Realteil des z -Feldes müssen wir nur ein paar Naturkonstanten herausziehen, um ihn mit dem Vektorpotential eines geladenen Teilchens in einem Magnetfeld zu identifizieren:

$$\operatorname{Re}z(\vec{x}, \mu) = -\frac{e}{\hbar}A_\mu(\vec{x})$$

Damit lautet die Schrödingergleichung im Kontinuum

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x}, t) = \frac{1}{2m}\sum_{\mu=1}^3\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_\mu} - eA_\mu(\vec{x})\right)^2\psi(\vec{x}, t) + U(\vec{x})\psi(\vec{x}, t) \quad (11.9)$$

wobei sich das skalare Potential U folgendermaßen zusammensetzt:

$$U(\vec{x}) = W(\vec{x}) + \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\mu=1}^3\left(\frac{\partial\operatorname{Im}z}{\partial x_\mu} + (\operatorname{Im}z(\vec{x}, \mu))^2\right)$$

Hier haben wir das $W(\vec{x})$ aus Gleichung (11.8) verwendet und angenommen, daß alle unendlichen Terme in (11.8) von dem freien Parameterfeld $V(\vec{x})$ kompensiert werden.

Unter physikalischen Gesichtspunkten ist es nicht ganz so überraschend, daß der Imaginärteil des z -Feldes zur potentiellen Energie eines Teilchens beiträgt. In Gleichung (11.5) führt ja $\operatorname{Im}z$ zu einem *reellen* Exponentialfaktor $\exp(-a\operatorname{Im}z(\vec{x}, \mu))$ und damit zu einer örtlich veränderlichen Hüpf-*Wahrscheinlichkeit*. Dies ist die Situation, die wir antreffen würden, wenn wir kartesische Koordinaten (unser kubisches Gitter) in einem gekrümmten Raum verwenden, so daß die *physikalische* Hüpfdistanz zu den Nachbarpunkten nicht überall gleich ist. In der Allgemeinen Relativitätstheorie spricht man dann von einer ortsabhängigen Metrik, und es ist bekannt, daß sie sich im nichtrelativistischen Limes als Gravitations*potential* manifestiert. Da wir die Schrödingergleichung ohne Nebenbedingungen hergeleitet haben, somit alle physikalisch möglichen Situationen damit erfassen sollten, muß es Beiträge zur potentiellen Energie sowohl von elektrischen Feldern als eben auch von Gravitationsfeldern geben. Die zusammengesetzte Struktur von $U(\vec{x})$ ist so gesehen nicht verwunderlich.

A Meßreihen und hermitische Operatoren

Der Zustand eines Quantensystems läßt sich durch Messungen bestimmen. Man muß jedoch unterscheiden zwischen dem Zustand *vor* der Messung, für den man sich ja eigentlich interessiert, und dem Zustand *danach*. Hat man den Meßwert m erhalten, so weiß man, daß das System von diesem Augenblick an durch einen Zustandsvektor $|m\rangle$ charakterisiert ist.

Wegen Axiom 5 muß bei einem zuverlässigen Meßgerät eine Orthogonalitätsbedingung erfüllt sein,

$$\langle m'|m\rangle = \delta_{mm'}$$

Nun kann man in der Linearen Algebra aus einem System von orthonormalen Basisvektoren $|m\rangle$ und zugehörigen Zahlen m eine *hermitische Abbildung* M konstruieren. Wir können ja einem beliebigen Zustandsvektor $|\psi\rangle$ den folgenden "Bildvektor" $M|\psi\rangle$ zuordnen:

$$M|\psi\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sum_m |m\rangle m \langle m|\psi\rangle \quad (\text{A.1})$$

Dabei sind m und $\langle m|\psi\rangle$ Zahlenfaktoren, die wir aus ästhetischen Gründen auf die rechte Seite vom Vektor $|m\rangle$ geschrieben haben. Setzen wir speziell $|\psi\rangle = |m_0\rangle$, so ergibt sich

$$M|m_0\rangle = m_0|m_0\rangle$$

Bei den Zustandsvektoren $|m\rangle$ handelt es sich also um *Eigenvektoren* der Abbildung M , und die möglichen Meßwerte m sind die zugehörigen Eigenwerte. Wie wir sehen werden, sind einige grundlegende Eigenschaften von Meßreihen an Quantenobjekten mathematisch eng mit linearen Abbildungen M verknüpft.

Wenn man ein Einzelexperiment an einem Quantenzustand sehr oft wiederholt, so ist die Meßreihe vor allem durch Mittelwert \bar{m} und Schwankung Δm charakterisiert. Beide Größen lassen sich durch die hermitische Abbildung M und den normierten Zustandsvektor $|\psi\rangle$ ausdrücken:

$$\bar{m} = \langle \psi|M|\psi\rangle \quad (\Delta m)^2 = \langle \psi|M^2|\psi\rangle - \bar{m}^2 \quad (\text{A.2})$$

Unter M^2 ist dabei die zweimalige Anwendung der Abbildung zu verstehen.

Zum Beweis von (A.2) brauchen wir nur in der Definitionsgleichung (A.1) auf beiden Seiten das Skalarprodukt mit $\langle\psi|$ zu bilden und uns an die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Meßwertes m zu erinnern; sie ist $w_m = |\langle m|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|m\rangle\langle m|\psi\rangle$. Also haben wir

$$\langle\psi|M|\psi\rangle = \sum_m \langle\psi|m\rangle m \langle m|\psi\rangle = \sum_m w_m m$$

Enthält die Reihe insgesamt N Messungen, und tritt der Meßwert m insgesamt n_m mal auf, so ist $w_m = n_m/N$. Also gilt

$$\langle\psi|M|\psi\rangle = \frac{1}{N} \sum_m n_m m = \bar{m}$$

nach der üblichen Definition des Mittelwertes.

Auch Schwankungen von Meßwerten sind Mittelwerte; meistens²⁰ betrachtet man den *Mittelwert der quadratischen Abweichung* $(m - \bar{m})^2$ des Einzelergebnisses m vom mittleren Meßergebnis \bar{m} . Mittelwerte und Schwankungen werden im Labor durch parallele Auswertung aus denselben Einzelmeßergebnissen gewonnen. Der Quantenzustand $|m\rangle$ weiß nichts davon, ob er mit dem Zahlenwert m oder $(m - \bar{m})^2$ in die Auswertung eingeht; daher haben die hermiteschen Operatoren in beiden Fällen dieselben Eigenvektoren $|m\rangle$ und lediglich verschiedene Eigenwerte. Genauer gilt

$$(\Delta m)^2 = \sum_m w_m (m - \bar{m})^2 = \sum_m \langle\psi|m\rangle (m - \bar{m})^2 \langle m|\psi\rangle$$

Die Eigenwerte sind hier also $(m - \bar{m})^2$ an Stelle von m . Der hermitesche Operator dazu ist $(M - \bar{m})^2$, wobei das Quadrat als zweimalige Ausführung des Differenzoperators $M - \bar{m}$ zu verstehen ist, und wobei \bar{m} der Operator ist, der einen Vektor lediglich mit der Zahl \bar{m} multipliziert. Zu dem Ausdruck (A.2) für $(\Delta m)^2$ kommt man, indem man $(M - \bar{m})^2$ ausmultipliziert und die Linearität des Skalarprodukts benutzt.

Der tiefere Sinn der Operator-Konstruktion zeigt sich insbesondere auch, wenn an einem Quantenzustand $|\psi\rangle$ *verschiedene* Messungen M_1 und M_2

²⁰In der Experimentalphysik wird manchmal auch der mittlere Absolutbetrag der Abweichung als Schwankungsmaß genommen, also $|m - \bar{m}|$; dieses ist aber in der Theorie schwieriger zu handhaben.

vorgenommen werden. Eine rein algebraische Eigenschaft der Operatoren, der *Kommutator*

$$[M_1, M_2] \stackrel{\text{def}}{=} M_1 M_2 - M_2 M_1$$

gibt nämlich den Quantenzuständen eine untere Grenze für das Produkt $\Delta M_1 \Delta M_2$ der Schwankungen vor, also für eine unmittelbar meßbare Größe. Diese allgemeine *Unschärferelation* ist

$$\Delta M_1 \Delta M_2 \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [M_1, M_2] | \psi \rangle \right| \quad (\text{A.3})$$

Es handelt sich dabei um eine physikalische Konsequenz aus der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung, die für beliebige Skalarprodukte gilt:

$$|\langle \psi_1, \psi_2 \rangle|^2 \leq \langle \psi_1, \psi_1 \rangle \langle \psi_2, \psi_2 \rangle$$

Zum Beweis von (A.3) betrachten wir zunächst den Fall, daß die Mittelwerte $\overline{m_1}$ und $\overline{m_2}$ im Zustand $|\psi\rangle$ null sind. Dann ist das Schwankungsquadrat $(\Delta M_1)^2$ einfach $\langle \psi | M_1^2 | \psi \rangle$, und das läßt sich wegen der Hermitizität von M_1 als $\langle M_1 \psi, M_1 \psi \rangle$ schreiben. Nach der Cauchy-Schwarzschen Ungleichung gilt

$$\sqrt{\langle M_1 \psi, M_1 \psi \rangle} \sqrt{\langle M_2 \psi, M_2 \psi \rangle} \geq |\langle M_1 \psi, M_2 \psi \rangle| \quad (\text{A.4})$$

Nun ist der Betrag $|z|$ einer komplexen Zahl größer als der Betrag des Imaginärteils $\text{Im } z = \frac{1}{2i}(z - \bar{z})$. Aus der Differenz $z - \bar{z}$ und aus der Eigenschaft $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \overline{\langle \psi_2, \psi_1 \rangle}$ von Skalarprodukten ergibt sich in unserer Anwendung ein Kommutatorausdruck:

$$\begin{aligned} \text{Im } \langle M_1 \psi, M_2 \psi \rangle &= \frac{1}{2i} \{ \langle M_1 \psi, M_2 \psi \rangle - \langle M_2 \psi, M_1 \psi \rangle \} \\ &= \frac{1}{2i} \{ \langle \psi, M_1 M_2 \psi \rangle - \langle \psi, M_2 M_1 \psi \rangle \} \\ &= \frac{1}{2i} \langle \psi, \{ M_1 M_2 - M_2 M_1 \} \psi \rangle \end{aligned}$$

Bei der Betragsbildung fällt der Faktor $1/i$ weg. Wir können nun Ungleichung (A.4) mit $|\langle M_1 \psi, M_2 \psi \rangle| \geq \frac{1}{2} |\langle \psi, [M_1 M_2] \psi \rangle|$ fortsetzen und haben damit die Unschärferelation (A.3) bewiesen.

B Anschlußbedingungen (alternativ)

Die stationäre Schrödingergleichung

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

enthält die zweite Ableitung der Wellenfunktion; daher würde man daher erwarten, daß $\psi(x)$ grundsätzlich zweimal differenzierbar sein sollte. Das ist auch der Fall, wenn das Potential $V(x)$ eine hinreichend glatte Funktion ist. Physikalisch sind aber auch “idealisierte” Potentiale mit Sprungstellen oder unendlichen Bereichen interessant. In diesen Fällen muß man sich über die Stetigkeit und Differenzierbarkeit von Wellenfunktionen Gedanken machen; dies bestimmt dann sogar das Verhalten der Wellenfunktion an den kritischen Stellen.

Es gibt nun *physikalische* Gründe dafür, daß die Ableitung der Wellenfunktion auf jeden Fall definiert sein muß. Man kann die kinetische Energie eines Teilchens *messen*, und damit auch ihren Mittelwert bestimmen. Dieser ist aber

$$\overline{E_{\text{kin}}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi(x)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) \right\} dx$$

wenn man die Wellenfunktion als bereits normiert annimmt. Die kinetische Energie enthält nun *Ableitungen* der Wellenfunktion. Es ist jedoch nicht allgemein erforderlich, daß die zweite Ableitung existiert, denn unter dem Integral ist sie äquivalent zu zwei ersten Ableitungen. Dies sieht man durch partielle Integration:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi(x)} \psi''(x) dx = \left[\overline{\psi(x)} \psi'(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\psi'(x)} \psi'(x) dx$$

Der Randterm verschwindet, wenn man eine realistische Wellenfunktion betrachtet, die für $x \rightarrow \pm\infty$ null ist; sonst könnte auch $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$ nicht gelten. Also ist der Mittelwert der kinetischen Energie direkt durch die erste Ableitung der Wellenfunktion gegeben:

$$\overline{E_{\text{kin}}} = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi'(x)|^2 dx \quad (\text{B.1})$$

Ein Zustand mit unendlicher kinetischer Energie kommt in der Natur nicht vor, daher muß das Integral (B.1) einen endlichen Wert haben. Mit Hilfe der

Cauchy-Schwarzschen Ungleichung läßt sich daraus folgern, daß die Änderung der Wellenfunktion über ein Intervall $[x, x + \epsilon]$ eng begrenzt ist²¹

$$|\psi(x + \epsilon) - \psi(x)| = \left| \int_x^{x+\epsilon} \psi'(x) \, dx \right| \leq \sqrt{\frac{2mE_{\text{kin}}}{\hbar^2}} \sqrt{\epsilon}$$

Für $\epsilon \rightarrow 0$ folgt daraus $\psi(x + \epsilon) \rightarrow \psi(x)$, also die Stetigkeit der Wellenfunktion. Sie gilt an jedem Ort x und unter allen Umständen.

Betrachten wir den Fall, daß das Potential $V(x)$ bereichsweise unendlich wird. In solchen Bereichen ist die Wellenfunktion null, um einen unendlichen Mittelwert der *potentiellen* Energie zu vermeiden. Beim Übergang in einen regulären Bereich muß sich die Wellenfunktion stetig verhalten, also mit einer Nullstelle beginnen. Daraus folgt zum Beispiel die bekannte Randbedingung beim Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden. Mathematisch ist die Wellenfunktion hier nicht mehr beidseitig differenzierbar, sondern nur noch halbseitig. Diesen etwas allgemeineren Ableitungsbegriff aus der Analysis brauchen wir also manchmal in der Physik!

Nachdem klar ist, daß sich die Wellenfunktion überall stetig verhalten wird, kann man mit Hilfe der Schrödingergleichung weitergehende Schlüsse ziehen. Wir wollen hier nur zeigen, daß auch die Ableitung der Wellenfunktion überall stetig sein muß, wenn das Potential $V(x)$ *beschränkt* bleibt. Aus der Schrödingergleichung folgt ja

$$\psi'(x + \epsilon) - \psi'(x) = \int_x^{x+\epsilon} \psi''(x) \, dx = \frac{2m}{\hbar^2} \int_x^{x+\epsilon} \{V(x) - E\} \psi(x) \, dx$$

Nach dem Mittelwertsatz gibt es ein x_0 im Integrationsbereich, so daß

$$\psi'(x + \epsilon) - \psi'(x) = \{V(x_0) - E\} \psi(x_0) \epsilon$$

Für $\epsilon \rightarrow 0$ folgt daraus $\psi'(x + \epsilon) \rightarrow \psi'(x)$, denn $V(x)$ ist nach Voraussetzung beschränkt, und $\psi(x)$ ist als stetige Funktion im Intervall $[x, x + \epsilon]$ beschränkt. Unter diesen sehr allgemeinen Voraussetzungen ist also die Wellenfunktion sogar *stetig differenzierbar*.

²¹Man faßt dazu das Integral als Skalarprodukt von $\psi'(x)$ mit der konstanten Funktion 1 im Intervall $[x, x + \epsilon]$ auf.