

Kapitel 9

Grundlagen der Quantenmechanik

In den vorangegangenen Kapiteln haben wir uns mit physikalischen Situationen und experimentellen Ergebnissen auseinandergesetzt, bei denen die klassische Physik nicht mehr ausreicht, um die beobachteten Phänomene befriedigend zu erklären. Diese Problematik motivierte die Einführung der Quantenmechanik. In Kapitel 8 haben wir z.B. erkannt, dass das Bohrsche Atommodell grundlegende Eigenschaften der Spektren von Atomen mit einem Elektron mit Hilfe semiklassischer Annahmen, die auf der Beschreibung der Eigenschaften von Teilchen durch Materiewellen beruhen, erklären kann. Um ein detailliertes physikalisches Verständnis von Atomen in elektromagnetischen Feldern oder Atomen mit mehreren Elektronen zu erlangen, erkannte man am Anfang des letzten Jahrhunderts schnell, dass eine vollständig neue Theorie, die heute als Quantenmechanik bekannt ist, benötigt werden würde.

Historisch gesehen wurden die Grundlagen der Quantenmechanik in den Jahren 1925 und 1926 mit Hilfe wichtiger Beiträge bekannter Physiker wie Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Max Born, Paul Dirac und anderer entwickelt. Das grundlegende Ziel war eine Theorie zu entwickeln, die die Welleneigenschaften von Teilchen korrekt beschreibt. Schon bis in die 1930er Jahre, kurz nach ihrer Entwicklung, konnten eine grosse Anzahl von Beobachtungen und Experimenten in der Physik und auch der Chemie durch diese neue Theorie erklärt werden.

In diesem Kapitel wollen wir uns nun mit den wichtigen Aspekten des Formalismus der Quantenmechanik beschäftigen. Die Theorie basiert auf einigen wenigen grundlegenden Postulaten, mit deren Hilfe alle Beobachtungen von quantenmechanischen Phänomenen in der Natur korrekt beschrieben werden können. Bis heute hat noch kein Experiment den Vorhersagen der Quantenmechanik widersprochen.

Hier führen wir in die Grundlagen der Quantenmechanik basierend auf der Wellenmechanik von de Broglie ein (vgl. Kapitel 6). Wir werden uns dabei zunächst auf die quantenmechanischen Eigenschaften der Dynamik einzelner Teilchen (Massepunkte) in einer Dimension, beschrieben durch die Ortskoordinate x und den Impuls p , beschränken.

9.1 Das erste Postulat: Wellenfunktionen

Wir beginnen mit dem ersten Postulat der Quantenmechanik. Zur Formulierung benötigen wir die folgende Definition.

Definition 9.1 Eine Funktion $f(x, t)$ heisst **quadratisch integabel**, falls gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x, t)f(x, t)dx < \infty, \quad (9.1)$$

wobei $f^*(x, t)$ die komplex konjugierte Funktion von $f(x, t)$ bezeichnet. Der Raum aller quadratisch integablen Funktionen wird mit L^2 bezeichnet.

Postulat 1 Zu einem Teilchen (Massepunkt) gehört eine eindeutige, quadratisch integable, im Allgemeinen komplexe Wellenfunktion $\psi(x, t)$. Sie beschreibt den Zustand des Teilchens. Dabei gibt $\psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ die Wahrscheinlichkeit an das Teilchen zur Zeit t zwischen x und $x + dx$ anzutreffen. Die Grösse $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ wird daher als **Wahrscheinlichkeitsdichte** bezeichnet.

Wir diskutieren zunächst einige wichtige Aspekte dieses Postulats. Da die Wellenfunktion quadratisch integabel ist, kann sie normiert werden. Dazu ziehen wir die Bedingung heran, dass die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t irgendwo auf der x -Achse anzutreffen 100% ist. Daher lautet die **Normierungsbedingung**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx = 1. \quad (9.2)$$

Weiter gilt nach dem Postulat 1, dass der Zustand des Teilchens durch die Wellenfunktion ψ bestimmt ist. Somit sind alle Informationen über die quantenmechanischen Eigenschaften eines Teilchens in ψ enthalten. Experimentell erfassbare Grössen werden in der Quantenmechanik durch Erwartungswerte charakterisiert. Nach der Wahrscheinlichkeitsrechnung gilt folgende Definition.

Definition 9.2 Der **Erwartungswert** einer Funktion $f(x, t)$, die eine gegebene physikalische Messgrösse beschreibt, ist für einen bestimmten Zeitpunkt t gegeben durch

$$\langle f(x, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)f(x, t)\psi(x, t)dx \quad (9.3)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{f(x, t)}_{\text{Funktionswert}} \underbrace{\psi^*(x, t)\psi(x, t)dx}_{\text{Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Funktionswerts}} \quad (9.4)$$

Dabei ist zu beachten, dass die instruktive Umformung in der zweiten Zeile nur dann gilt, wenn die Funktion $f(x, t)$ reelle oder komplexe Werte annimmt. Handelt es sich bei der Funktion um einen sogenannten Operator, so ist (9.3) in der gegebenen Form explizit zu verwenden, wie wir in Abschnitt 9.3 einsehen werden. Beispiele für Funktionen $f(x, t)$ sind die Ortskoordinate $x(t)$ des Teilchens oder seine potentielle Energie $V(x, t)$.

9.1.1 Beispiel: Teilchen im Potentialtopf

Wir kommen nun zu einem Beispiel zur Veranschaulichung des ersten Postulats. Wir betrachten ein Teilchen in einem eindimensionalen Potentialtopf (vgl. Abb. 9.1). D.h. die Bewegung des Teilchens entlang der x -Richtung ist durch harte Wände an den Positionen $x = 0$ und $x = L$ eingeschränkt. Damit sind die Gebiete $x < 0$ und $x > L$ für das Teilchen nicht erreichbar. Diese Tatsache wird durch das folgende Potential $V(x)$ beschrieben

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (9.5)$$

Wir betrachten das Teilchen nun als Materiewelle. Im Bereich $0 \leq x \leq L$ kann sich das Teilchen frei bewegen. Daher setzen wir für die Wellenfunktion $\psi(x, t)$, die den Zustand des Teilchens in diesem Bereich beschreibt, die Wellenfunktion für ein freies Teilchen an. Nach (6.17) gilt

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}. \quad (9.6)$$

Klassisch gesehen besteht für ein freies Teilchen zwischen der Energie E und dem Impuls p die folgende Beziehung

$$E = \frac{p^2}{2m} \rightarrow p = \pm\sqrt{2mE}. \quad (9.7)$$

D.h. bei konstanter Energie E kann der Impuls p in einer Dimension zwei mögliche Werte annehmen, die einer Bewegung des Teilchens entlang der positiven oder negativen Koordinatenachse entspricht. Wir erweitern daher unseren Ansatz zu einer Superposition von einer nach rechts und einer nach links laufenden Materiewelle

$$\psi(x, t) = \left(Ae^{ipx/\hbar} + Be^{-ipx/\hbar} \right) e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.8)$$

Nun berücksichtigen wir, dass die freie Bewegung des Teilchens auf den Bereich $0 \leq x \leq L$ beschränkt ist. D.h. die betrachtete Wellenfunktion muss folgenden Randbedingungen genügen

$$\psi(0, t) = \psi(L, t) = 0. \quad (9.9)$$

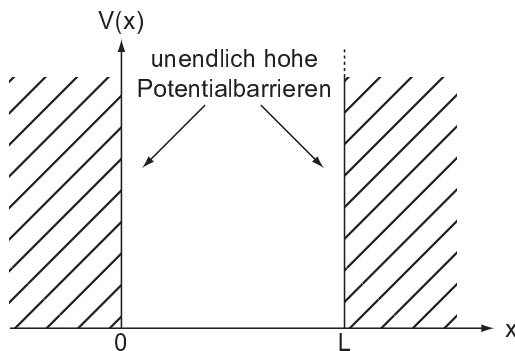


Abb. 9.1: Das Potential $V(x)$ in Abhängigkeit von x für ein Teilchen im Potentialtopf.

Aus $\psi(0, t) = 0$ folgt $A + B = 0$. Damit erhalten wir

$$\psi(x, t) = A \left(e^{ipx/\hbar} - e^{-ipx/\hbar} \right) e^{-iEt/\hbar} = 2iA \sin(px/\hbar) e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.10)$$

Aus $\psi(L, t) = 0$ folgt $\sin(pL/\hbar) = 0$ und damit $pL/\hbar = n\pi$ mit $n \in \mathbb{N}$. Woraus wir die Bedingung erhalten, dass der Impuls p und damit die Energie E des Teilchens im Potentialtopf nur diskrete Werte E_n annehmen kann

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 n^2 \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (9.11)$$

Hier erkennen wir, dass die Beschreibung eines Teilchens in einem Potentialtopf als Materiewelle auf natürliche Art und Weise zu einer diskreten Abfolge von möglichen Energiewerten des Teilchens, also zu einer Quantisierung, führt.

Die Wellenfunktion $\psi_n(x, t)$ zur Energie E_n nimmt damit die folgende Form an

$$\psi_n(x, t) = \begin{cases} 2iA \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-iE_n t/\hbar}, & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (9.12)$$

Zur Bestimmung der Konstanten A ziehen wir nun die Normierungsbedingung (9.2) heran. Wir erhalten

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x, t) \psi_n(x, t) dx \\ &= 4A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx \\ &= 4A^2 \left(\frac{x}{2} - \frac{\sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right)}{4n\pi/L} \right) \Big|_0^L \\ &= 2A^2 L. \end{aligned} \quad (9.13)$$

Daraus ergibt sich $A = \sqrt{1/(2L)}$ und somit für die Wellenfunktion $\psi_n(x, t)$ zur Energie E_n für das Teilchen im Potentialtopf das folgende Resultat

$$\psi_n(x, t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} i \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-iE_n t/\hbar}, & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (9.14)$$

In der Abb. 9.2 sind die Wellenfunktionen $\psi_n(x, t)$ und die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten $|\psi_n(x, t)|^2$ für die Zustände $n = 1, 2, 3$ skizziert.

Ein Potentialtopf, wie wir ihn hier besprochen haben, ist ein gutes Modell für die Energieniveaus von Elektronen in sogenannten *Quantenpunkten* (*quantum dots*). Die Elektronen in Quantenpunkten sind in ihrer Beweglichkeit in allen drei Raumrichtungen eingeschränkt. Realisiert werden Quantenpunkte in sogenannten Nanostrukturen, welche grösstenteils aus verschiedenen Halbleitermaterialien aufgebaut sind.

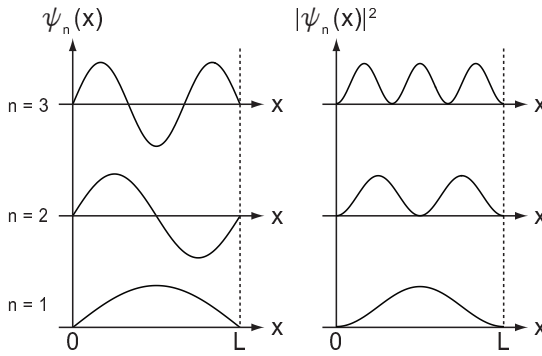


Abb. 9.2: Die Wellenfunktionen $\psi_n(x, t)$ und die entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichten $|\psi_n(x, t)|^2$ für die Zustände $n = 1, 2, 3$ für ein Teilchen im Potentialtopf.

9.1.2 Darstellung der Wellenfunktion im Impulsraum

Bisher haben wir die Wellenfunktion als eine Funktion der Ortsvariablen x betrachtet. Wir haben also die sogenannte *Ortsraumdarstellung* gewählt. Anstelle der Ortskoordinate x kann jedoch auch der entsprechende Impuls p als Variable eingeführt werden. Man postuliert dann eine weitere, ebenfalls eindeutige, quadratisch integrierbare, im Allgemeinen komplexe Wellenfunktion $\phi(p, t)$, die den Zustand des Teilchens im folgenden Sinne beschreibt: $\phi^*(p, t)\phi(p, t)dp$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen zur Zeit t einen Impuls zwischen p und $p + dp$ besitzt.

Auch für diese Wellenfunktion gilt eine **Normierungsbedingung**

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t)\phi(p, t)dp = 1. \tag{9.15}$$

Wir können auch hier für eine Funktion $g(p, t)$, die sich aufs Teilchen bezieht, den entsprechenden Erwartungswert definieren.

Definition 9.3 Der **Erwartungswert** einer Funktion $g(x, t)$ ist für einen bestimmten Zeitpunkt t gegeben durch

$$\langle g(p, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p, t)g(p, t)\phi(p, t)dp \tag{9.16}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{g(p, t)}_{\text{Funktionswert}} \underbrace{\phi^*(p, t)\phi(p, t)dp}_{\text{Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Funktionswerts}} \tag{9.17}$$

Hier gelten die selben Einschränkungen wie wir sie bereits für die Wellenfunktionen im Ortsraum diskutiert haben. Beispiele für die Funktion $g(p, t)$ sind der Impuls $p(t)$ des Teilchens oder seine kinetische Energie $E_{\text{kin}} = p^2/(2m)$.

Nun wollen wir untersuchen, welcher Zusammenhang zwischen der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ im Ortsraum und der Wellenfunktion $\phi(p, t)$ im Impulsraum besteht. Wir betrachten dazu ein Teilchen mit konstanter Gesamtenergie $E = \hbar\omega$, z.B. ein Teilchen, das sich mit konstanter kinetischer Energie in einem konstanten Potential $V(x)$ bewegt. Der Zustand wird durch ein entsprechendes

Wellenpaket $\psi(x, t)$ beschrieben (vgl. Abschnitt 6.4)

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk = \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk. \quad (9.18)$$

Der Faktor $e^{i\omega t}$ ist hier ein nichtrelevanter Phasenfaktor (physikalisch ist nur $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ entscheidend). Wir schreiben daher

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx} dk, \quad (9.19)$$

wobei $A(k)$ durch die entsprechende Fouriertransformierte gegeben ist

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx. \quad (9.20)$$

Mit der de Broglie-Beziehung $p = \hbar k$ folgt damit, dass auch die Wellenfunktionen im Orts- bzw. Impulsraum $\psi(x)$ und $\phi(p)$ durch eine Fouriertransformation miteinander verbunden sind. Es gilt

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp, \quad (9.21)$$

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (9.22)$$

9.2 Die Heisenbergsche Unschärferelation

In der klassischen Mechanik sind die Eigenschaften eines Teilchens, wie zum Beispiel sein Ort x und sein Impuls p , *gleichzeitig* beliebig genau bestimmt. Diese Eigenschaften lassen sich im Prinzip mit beliebiger, nur durch die Messapparatur begrenzter, Genauigkeit in einer Messung bestimmen.

Im Gegensatz dazu ist eine charakteristische Eigenschaft der Quantenmechanik, dass der Ort x und der Impuls p eines Teilchens nicht *gleichzeitig* beliebig genau bestimmt sind. Versucht man zum Beispiel x und p gleichzeitig zu messen, so gilt, dass das Produkt der Standardabweichungen der Messresultate für Ort und Impuls immer grösser ist als eine Konstante, die durch die Quantenmechanik bestimmt ist. Diese Eigenschaft der Quantenmechanik wird als Heisenbergsche Unschärferelation bezeichnet.

Diese Unschärferelation gilt nicht nur für Ort und Impuls eines Teilchens sondern auch für andere Grössen, wie z.B. Energie und Zeit oder die Komponenten des Drehimpulses in drei Dimensionen, wie wir später kennen lernen werden.

Bevor wir uns der Einbettung der Unschärferelation in die Wellenmechanik zuwenden, betrachten wir als Illustration die Beugung einer Materiewelle am Spalt.

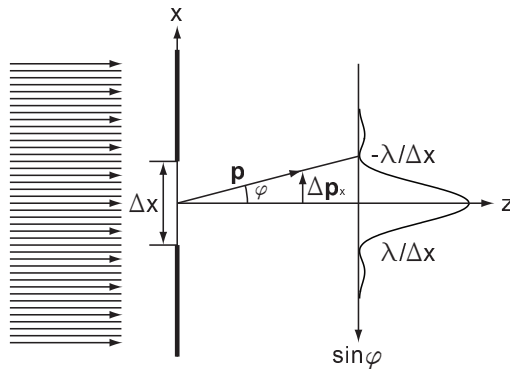


Abb. 9.3: Die Beugung einer Materiewelle am Spalt.

9.2.1 Beispiel: Beugung einer Materiewelle am Spalt

Wir betrachten die in Abb. 9.3 skizzierte Anordnung: Ein Teilchenstrom bewegt sich von links auf einen Spalt der Breite Δx zu. Der Spalt sei bei $z = 0$ positioniert. Vor dem Spalt, d.h. für $z < 0$, kennt man die x -Koordinate des Teilchens nicht, dafür ist die Impulskomponente p_x genau bekannt. Trifft nun dieser Teilchenstrahl auf den Spalt, so erfolgt eine Selektion der Teilchen. Die x -Koordinate ist dann bis auf die Unschärfe Δx bekannt. Jedoch gibt es durch die Beugung am Spalt Teilchen, die unter einem nicht verschwindenden Winkel φ auslaufen. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ergibt sich aus der Beugung der Materiewelle (de Broglie Welle). Die meisten Teilchen treffen in den Winkelbereich

$$-\frac{\lambda}{\Delta x} < \sin \varphi < \frac{\lambda}{\Delta x}. \quad (9.23)$$

Damit kann die in Abb. 9.3 eingezeichnete Grösse Δp_x als Unschärfe der Impulskomponente p_x aufgefasst werden. Es gilt dabei der folgende Zusammenhang

$$\frac{\Delta p_x}{p} = \frac{\lambda}{\Delta x}. \quad (9.24)$$

Mit der de Broglie-Beziehung $\lambda = h/p$ erhalten wir

$$\Delta p_x \Delta x = h. \quad (9.25)$$

Berücksichtigt man die Tatsache, dass einige Teilchen auch in die Nebenmaxima fallen, so wird aus der Gleichung eine Ungleichung

$$\Delta p_x \Delta x > h. \quad (9.26)$$

Diese Ungleichung besagt, dass die Ortskoordinate x und die Impulskomponente p_x gleichzeitig nicht beliebig genau bestimmbar sind.

In diesem Abschnitt haben wir den Begriff der Unschärfe anhand eines Beispiels eingeführt. Nun wenden wir uns der formalen Berechnung der Unschärferelation eines Teilchens im Rahmen der Wellenmechanik zu.

9.2.2 Definition Unschärfe

Definition 9.4 Entsprechend den Gesetzen der Wahrscheinlichkeitsrechnung ist die **Unschärfe** Δf einer Grösse f bestimmt durch die Standardabweichung, die durch die Wurzel des Erwartungswerts der Quadrate der Abweichungen vom Erwartungswert gegeben ist

$$\Delta f = \sqrt{\langle (f - \langle f \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}. \quad (9.27)$$

Wir wenden diese Definition 9.4 auf ein Teilchen an, dessen Zustand durch eine reelle Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben ist. $\psi(x)$ ist so beschaffen, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(x)|^2$ des Teilchens einer Gaussverteilung entspricht

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{a\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/(2a^2)} \quad (9.28)$$

und somit ein Wellenpaket der charakteristischen Breite a formt. Diese Funktion ist normiert, d.h. es gilt

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (9.29)$$

Für den Erwartungswert $\langle x \rangle$ der Ortskoordinate erhalten wir

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* x \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 x dx = 0, \quad (9.30)$$

d.h. $\psi(x)$ beschreibt ein Teilchen, das sich im Mittel bei $x = 0$ aufhält. Damit ergibt sich für die Unschärfe Δx der Ortskoordinate

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\ &= \sqrt{\langle x^2 \rangle} = \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* x^2 \psi(x) dx} \\ &= \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 x^2 dx} \\ &= a. \end{aligned} \quad (9.31)$$

Δx entspricht also gerade der Breite der Gaussverteilung.

Um die Eigenschaften der Impulsverteilung des Teilchens zu bestimmen, berechnen wir die Wellenfunktion $\phi(p)$ in der Impulsraumdarstellung. Mit Hilfe der Fouriertransformation (9.21) erhalten wir

$$\begin{aligned} \phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/(4a^2)} e^{-ipx/\hbar} dx, \end{aligned} \quad (9.32)$$

Die Ausführung der Integration liefert

$$\phi(p) = \left(\frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} e^{-a^2 p^2 / \hbar^2}. \quad (9.33)$$

Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\phi(p)|^2$ im Impulsraum

$$|\phi(p)|^2 = \frac{2a}{\hbar\sqrt{2\pi}} e^{-2a^2 p^2 / \hbar^2}. \quad (9.34)$$

Der Erwartungswert nimmt den Wert $\langle p \rangle = 0$ an, d.h. das Teilchen hat einen verschwindenden mittleren Impuls. Gleichzeitig ergibt sich eine Impulsunschärfe Δp von

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle} = \frac{\hbar}{2a}. \quad (9.35)$$

Mit (9.31) erhalten wir daraus für die Unschärferelation eines Gausschen Wellenpakets

$$\Delta x \Delta p = \frac{1}{2} \hbar. \quad (9.36)$$

Das Gaussche Wellenpaket erfüllt somit gerade die minimale Unschärferelation (vgl. Abschnitt 9.2.3).

9.2.3 Formulierung nach Heisenberg

Nachdem wir zwei Beispiele zur Unschärferelation betrachtet haben, kommen wir zur Formulierung der Unschärferelation nach Werner Heisenberg, wie sie 1927 aufgestellt wurde. Wir schreiben sie hier für die Ortskoordinate x und die Impulskomponente p_x

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \hbar. \quad (9.37)$$

Für die allgemeine Formulierung und die Herleitung sei auf weiterführende Literatur [10] verwiesen.

Wir erwähnen hier noch eine weitere Form der Heisenbergschen Unschärferelation, die sogenannte *Energie-Zeit-Unschärferelation*. Es gilt

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2} \hbar. \quad (9.38)$$

Die Formulierung (9.38) sagt aus, dass die Energie E eines Systems, welches für die Zeitspanne Δt existiert, z.B. ein Atom dessen Lebensdauer im angeregten Zustand durch Δt gegeben ist, nur auf ΔE genau bestimmt ist. Diese Relation legt zum Beispiel die Breite von spektralen Linien eines atomaren Übergangs im Verhältnis zur Lebensdauer des angeregten Zustands des Atoms fest.

9.3 Operatoren

Operatoren spielen in der Quantenmechanik eine entscheidende Rolle. Denn jede physikalische Grösse f wird durch einen entsprechenden Operator \hat{f} dargestellt. Die Bedeutung von Operatoren im Rahmen der Quantenmechanik, besprechen wir in diesem Abschnitt.

9.3.1 Erwartungswerte von Ortskoordinate und Impuls

Der Erwartungswert des Impulses in der Ortsraumdarstellung

Wir beginnen mit einer Diskussion der Frage, wie sich der Erwartungswert des Impulses in der Ortsraumdarstellung berechnen lässt.

Wenn wir den Zustand des Teilchens durch die Wellenfunktion $\phi(p)$ im Impulsraum beschreiben, so lässt sich der Erwartungswert des Impulses $\langle p \rangle$ einfach als Mittelwert von p zur Wellenfunktion $\phi(p)$ berechnen

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) p \phi(p) dp. \quad (9.39)$$

Wenn der Zustand des Teilchens aber durch die Wellenfunktion $\psi(x)$ im Ortsraum beschrieben wird, so muss folgender Erwartungswert

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) p \psi(x) dx, \quad (9.40)$$

berechnet werden.

Hier stellt sich nun die Frage in welchem Zusammenhang der Impuls p des Teilchens mit der Wellenfunktion $\psi(x)$ steht. Zur Lösung des Problems gehen wir von der Impulsraumdarstellung aus und gehen dann durch die Fouriertransformation auf die Ortsraumdarstellung über. In einem ersten Schritt setzen wir für $\phi(p)$ in (9.39) die Fouriertransformierte ein

$$\langle p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) p \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx dp. \quad (9.41)$$

Wir schreiben das Integral über x mittels partieller Integration um

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx = \underbrace{-\psi(x) \frac{\hbar}{ip} e^{-ipx/\hbar}}_{=0} \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \frac{\hbar}{ip} e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (9.42)$$

Der erste Summand verschwindet, da $\psi(x)$ quadratisch integrierbar (normierbar) ist und somit insbesondere im Unendlichen gegen null strebt. Einsetzen in (9.41) und Umformen liefert

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} e^{-ipx/\hbar} dx dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) e^{-ipx/\hbar} dp}_{=\psi^*(x)} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) dx. \end{aligned} \quad (9.43)$$

Wir kommen somit zu folgendem Schluss:

In der Ortsraumdarstellung, in der der Zustand eines Teilchens durch die Wellenfunktion $\psi(x)$ beschrieben ist, wird der Erwartungswert des Impulses p berechnet, indem man in (9.40) den Impuls p durch den Impulsoperator

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (9.44)$$

ersetzt.

Der Erwartungswert der Ortskoordinate in der Impulsraumdarstellung

Analog können wir nun auch den Erwartungswert der Ortskoordinate x in der Impulsraumdarstellung berechnen. Wir gehen hier entsprechend von der Ortsraumdarstellung aus und wechseln mittels Fouriertransformation in die Impulsraumdarstellung

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp dx. \end{aligned} \quad (9.45)$$

Partielle Integration für das Integral über p liefert

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(p) e^{ipx/\hbar} dp = \underbrace{\phi(p) \frac{\hbar}{ix} e^{ipx/\hbar} \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \phi(p)}{\partial p} \frac{\hbar}{ix} e^{ipx/\hbar} dp. \quad (9.46)$$

Der erste Summand verschwindet, da auch $\phi(p)$ quadratisch integrierbar (normierbar) ist und somit insbesondere im Unendlichen gegen null strebt. Einsetzen in (9.45) und Umformen liefert

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) e^{ipx/\hbar} dx}_{=\phi^*(p)} \left(-\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial \phi(p)}{\partial p} dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) dp. \end{aligned} \quad (9.47)$$

Wir fassen zusammen:

In der Impulsraumdarstellung, in der der Zustand eines Teilchens durch die Wellenfunktion $\phi(p)$ beschrieben ist, wird der Erwartungswert der Ortskoordinate x berechnet, indem man die Ortskoordinate x in

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) x \phi(p) dp \quad (9.48)$$

durch den Ortsoperator

$$\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \quad (9.49)$$

ersetzt.

In der Ortsraumdarstellung ist der Ortsoperator \hat{x} trivialerweise der Faktor x und in der Impulsdarstellung ist der Impulsoperator \hat{p} trivialerweise der Faktor p . In Tab. 9.1 sind die Berechnungen für die Erwartungswerte für die Ortskoordinate x und den Impuls p für die Orts- und Impulsraumdarstellung zusammengefasst. Es ist zu bemerken, dass die Operatoren jeweils auf die nachfolgende Funktion wirken und daher die Reihenfolge der Faktoren von entscheidender Bedeutung ist.

Der Erwartungswert von Potenzen der Ortskoordinate und des Impulses

Entsprechend zu den vorangegangenen Berechnungen in diesem Abschnitt können auch die Erwartungswerte von Potenzen der Ortskoordinate x und des Impulses p berechnet werden. Es ergibt sich für den Erwartungswert von Potenzen von p in der Ortsraumdarstellung

$$\langle p^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \right)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n} \psi(x) dx \quad (9.50)$$

und entsprechend für den Erwartungswert von Potenzen von x in der Impulsraumdarstellung

$$\langle x^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) (i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial p^n} \phi(p) dp. \quad (9.51)$$

9.3.2 Weitere wichtige Operatoren in Ortsraumdarstellung

Nachdem wir nun die Operatoren für die Ortskoordinate x und den Impuls p in Orts- und Impulsraumdarstellung kennengelernt haben, betrachten wir weitere Beispiele von Operatoren. Wir beschränken uns dabei auf die Ortsraumdarstellung.

Der Ortsoperator in 3D

Wie wir im letzten Abschnitt gesehen haben, ist der Ortsoperator \hat{x} in Ortsraumdarstellung gleich dem Faktor x . Entsprechend gilt in drei Dimensionen

Ortsraumdarstellung	Impulsraumdarstellung
$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx$	$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) dp$
$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) dx$	$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(p) p \phi(p) dp$

Tab. 9.1: Berechnungen der Erwartungswerte für die Ortskoordinate x und den Impuls p in Orts- und Impulsraumdarstellung.

für den Ortsoperator $\hat{\vec{r}}$ die folgende einfache Darstellung

$$\hat{\vec{r}} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (9.52)$$

Der Impulsoperator in 3D

Beschreiben wir die Bewegung eines Teilchens im dreidimensionalen Raum in kartesischen Koordinaten, dann ist jeder Impulskomponente ein Operator zugeordnet. Nach (9.44) gilt für die Operatoren \hat{p}_x , \hat{p}_y und \hat{p}_z der Impulskomponenten

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad (9.53)$$

$$\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad (9.54)$$

$$\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (9.55)$$

Dem Impulsvektor $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ ist also ein Impulsoperator $\hat{\vec{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ zugeordnet. Wenn man ihn auf eine Wellenfunktion anwendet, so resultiert ein Vektor.

Die Erwartungswerte der Impulskomponenten p_x , p_y und p_z lassen sich berechnen durch

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, y, z) dx dy dz, \quad (9.56)$$

$$\langle p_y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \psi(x, y, z) dx dy dz, \quad (9.57)$$

$$\langle p_z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \psi(x, y, z) dx dy dz. \quad (9.58)$$

Der Hamiltonoperator

Aus der klassischen Mechanik ist die Hamiltonfunktion H bekannt. Sie entspricht der Gesamtenergie E eines Systems ausgedrückt als Funktion der verallgemeinerten Koordinaten q_k und der dazu kanonisch konjugierten Impulse p_k . Der *Hamiltonoperator* \hat{H} ist die zugehörige quantenmechanische Grösse.

Wir betrachten als Beispiel die Bewegung eines Teilchens der Masse m mit den kartesischen Koordinaten x , y und z im Potential $V(x, y, z)$. Die konjugierten Impulse sind demzufolge die kartesischen Impulskomponenten p_x , p_y und p_z . Wir beschränken uns hier auf eine nichtrelativistische Betrachtung. Klassisch gelten die folgenden Beziehungen

$$p_x = m\dot{x}, \quad (9.59)$$

$$p_y = m\dot{y}, \quad (9.60)$$

$$p_z = m\dot{z}. \quad (9.61)$$

Damit lässt sich die kinetische Energie E_{kin} schreiben als

$$E_{\text{kin}} = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \quad (9.62)$$

Die entsprechende Hamiltonfunktion H lautet somit

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z). \quad (9.63)$$

Den entsprechenden Hamiltonoperator \hat{H} in Ortsraumdarstellung erhalten wir, indem wir die Impulskomponenten p_x , p_y und p_z durch die entsprechenden Impulsoperatoren \hat{p}_x , \hat{p}_y und \hat{p}_z in Ortsraumdarstellung ersetzen. Mit (9.53), (9.54) und (9.55) ergibt sich somit für den Hamiltonoperator \hat{H}

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \underbrace{\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)}_{=\Delta} + V(x, y, z), \quad (9.64)$$

wobei Δ den *Laplace-Operator* bezeichnet. Die potentielle Energie $V(x, y, z)$ ist kein Differentialoperator, da sie die Impulskomponenten nicht enthält. Sie wirkt als Faktor.

Der Erwartungswert der Hamiltonfunktion H ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z) \hat{H} \psi(x, y, z) dx dy dz \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, y, z) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z) \right) \psi(x, y, z) dx dy dz. \end{aligned} \quad (9.65)$$

Der Drehimpulsoperator

Der (klassische) Drehimpulsvektor \vec{L} eines Teilchens bzgl. des Ursprungs ist definiert als

$$\vec{L} = \begin{pmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{pmatrix} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}, \quad (9.66)$$

wobei \vec{r} den Ortsvektor und \vec{p} den Impulsvektor bezeichnen. Zum Drehimpulsoperator gelangen wir nun, indem wir für jede Impulskomponente den entsprechenden Operator einsetzen. Die Ortskoordinaten bleiben als Faktoren stehen, da wir in der Ortsraumdarstellung rechnen. Es gilt

$$\hat{\vec{L}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}. \quad (9.67)$$

Beim Wasserstoffatom bewegt sich das Elektron im Zentralpotential des Kerns (vgl. Kapitel 11). Es zeigt sich, dass diese Bewegung eines Teilchens im

Zentralpotential einfachheitshalber in Kugelkoordinaten behandelt wird. Aus diesem Grund geben wir hier den Drehimpulsoperator zusätzlich auch in Kugelkoordinaten an. Man erhält für den Drehimpulsoperator $\hat{\vec{L}}$ in Kugelkoordinaten

$$\hat{\vec{L}} = \begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \sin \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{pmatrix}. \quad (9.68)$$

Wir beweisen die Richtigkeit dieses Ausdrucks indem wir auf die kartesischen Koordinaten zurückrechnen. Die Umrechnung zwischen kartesischen Koordinaten und Kugelkoordinaten lautet (vgl. Abb. 9.4)

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad (9.69)$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad (9.70)$$

$$z = r \cos \vartheta. \quad (9.71)$$

i) Für die x-Komponente des Drehimpulsoperators \hat{L}_x gilt

$$\begin{aligned} \hat{L}_x \psi &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \vartheta} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \vartheta} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi} \right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} r \cos \vartheta \cos \varphi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \cos \vartheta \sin \varphi - \frac{\partial \psi}{\partial z} r \sin \vartheta \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\cos \vartheta \cos \varphi}{\sin \vartheta} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x} r \sin \vartheta \sin \varphi + \frac{\partial \psi}{\partial y} r \sin \vartheta \cos \varphi + 0 \right) \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(-\frac{\partial \psi}{\partial y} \underbrace{(r \cos \vartheta \sin^2 \varphi + r \cos \vartheta \cos^2 \varphi)}_{=z} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \underbrace{r \sin \vartheta \sin \varphi}_{=y} \right) \\ &= \frac{\hbar}{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \psi. \quad (9.72) \end{aligned}$$

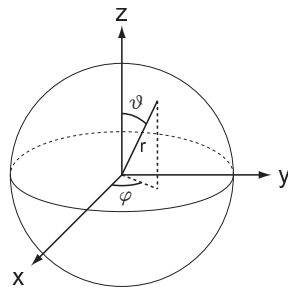


Abb. 9.4: Illustration der Kugelkoordinaten.

ii) Für die y-Komponente des Drehimpulsoperators \hat{L}_y gilt

$$\begin{aligned}
\hat{L}_y\psi &= \frac{\hbar}{i} \left(\cos\varphi \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} - \frac{\cos\vartheta \sin\varphi}{\sin\vartheta} \frac{\partial\psi}{\partial\varphi} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\cos\varphi \left(\frac{\partial\psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial\vartheta} + \frac{\partial\psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial\vartheta} + \frac{\partial\psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial\vartheta} \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\cos\vartheta \sin\varphi}{\sin\vartheta} \left(\frac{\partial\psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial\varphi} \right) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\cos\varphi \left(\frac{\partial\psi}{\partial x} r \cos\vartheta \cos\varphi + \frac{\partial\psi}{\partial y} r \cos\vartheta \sin\varphi - \frac{\partial\psi}{\partial z} r \sin\vartheta \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\cos\vartheta \sin\varphi}{\sin\vartheta} \left(-\frac{\partial\psi}{\partial x} r \sin\vartheta \sin\varphi + \frac{\partial\psi}{\partial y} r \sin\vartheta \cos\varphi + 0 \right) \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial\psi}{\partial x} \underbrace{(r \cos\vartheta \cos^2\varphi + r \cos\vartheta \sin^2\varphi)}_{=z} - \frac{\partial\psi}{\partial z} \underbrace{r \sin\vartheta \cos\varphi}_{=x} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi. \tag{9.73}
\end{aligned}$$

iii) Für die z-Komponente des Drehimpulsoperators \hat{L}_z gilt

$$\begin{aligned}
\hat{L}_z\psi &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} \psi \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial\psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial\varphi} + \frac{\partial\psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial\varphi} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(-\frac{\partial\psi}{\partial x} \underbrace{r \sin\vartheta \sin\varphi}_{=y} + \frac{\partial\psi}{\partial y} \underbrace{r \sin\vartheta \cos\varphi}_{=x} \right) \\
&= \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi. \tag{9.74}
\end{aligned}$$

Diese Ausdrücke stimmen mit (9.67) überein, womit die Richtigkeit von (9.68) bewiesen ist.

Bemerkung

Das Plancksche Wirkungsquantum \hbar hat die Dimension des Drehimpulses. In der Quantenmechanik wird deshalb der Drehimpuls oft in Einheiten von \hbar angegeben, sodass in den Formeln für den Drehimpuls der Faktor \hbar entfällt.

9.3.3 Eigenschaften von Operatoren in der Quantenmechanik

Wir haben bisher an diversen Beispielen erörtert, wie eine physikalische Grösse f in der Quantenmechanik durch einen entsprechenden Operator \hat{f} dargestellt wird. In Tab. 9.2 sind die kennengelernten Operatoren in der Ortsraumdarstellung nochmals zusammengefasst. Wir definieren nun zum Abschluss dieses Abschnitts allgemein was man unter einem Operator in der Quantenmechanik versteht und gehen auf seine Eigenschaften ein.

Physikalische Grösse	klassisch	Operator
Ortsvektor	$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$	$\hat{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$
Impulsvektor	$\vec{p} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$	$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}$
Hamiltonfunktion	$H = E = \frac{p^2}{2m} + V(x, y, z)$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(x, y, z)$
Drehimpulsvektor	$\vec{L} = \begin{pmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{pmatrix}$	$\hat{L} = \frac{\hbar}{i} \begin{pmatrix} y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \\ z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \\ x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$

Tab. 9.2: Quantenmechanische Operatoren in der Ortsraumdarstellung zu verschiedenen physikalischen Grössen.

Definition 9.5 Ein *quantenmechanischer Operator* \hat{F} ist definiert durch die Bedingung, dass für eine Funktion $\psi \in L^2$ gilt

$$\hat{F}\psi = \varphi \in L^2. \quad (9.75)$$

Dabei bezeichnet L^2 den Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen (vgl. Definition 9.1).

Wir gehen nun auf einige Eigenschaften quantenmechanischer Operatoren ein.

1. Linearität

Eine erste Eigenschaft quantenmechanischer Operatoren ist die Linearität:

Definition 9.6 Sei \hat{F} ein Operator, so heisst \hat{F} *linear* falls gilt

$$\hat{F}(\psi_1 + \psi_2) = \hat{F}\psi_1 + \hat{F}\psi_2, \hat{F}(c\psi) = c\hat{F}\psi \text{ mit } c \in \mathbb{C}. \quad (9.76)$$

2. Distributivgesetz

Quantenmechanische Operatoren erfüllen zudem das Distributivgesetz.

Definition 9.7 Seien \hat{F} und \hat{G} zwei Operatoren, so lautet das **Distributivgesetz**

$$(\hat{F} + \hat{G})\psi = \hat{F}\psi + \hat{G}\psi. \quad (9.77)$$

3. Assoziativgesetz

Quantenmechanische Operatoren erfüllen ebenfalls das Assoziativgesetz.

Definition 9.8 Seien \hat{F} und \hat{G} zwei Operatoren, so lautet das **Assoziativgesetz**

$$(\hat{F}\hat{G})\psi = \hat{F}(\hat{G}\psi). \quad (9.78)$$

4. Kommutativgesetz

Jedoch kommutieren quantenmechanische Operatoren im Allgemeinen **nicht**. Bevor wir die Definition des Kommutativgesetzes angeben, führen wir den Begriff des Kommutators ein.

Definition 9.9 Seien \hat{F} und \hat{G} zwei Operatoren, so ist der **Kommutator** $[\hat{F}, \hat{G}]$ definiert als

$$[\hat{F}, \hat{G}] = \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}. \quad (9.79)$$

Mit Hilfe dieser Definition 9.9 formulieren wir das Kommutativgesetz.

Definition 9.10 Zwei Operatoren \hat{F} und \hat{G} **kommutieren** falls der Kommutator verschwindet, d.h.

$$[\hat{F}, \hat{G}] = 0. \quad (9.80)$$

Ist der Kommutator ungleich null, so kommutieren die beiden Operatoren nicht.

Wir betrachten dazu einige Beispiele. Als erstes betrachten wir die zu den Funktionen xp_x und $p_x x$ gehörenden Operatoren $\hat{x}\hat{p}_x$ und $\hat{p}_x\hat{x}$ in der Ortsraumdarstellung. Es gilt

$$\hat{x}\hat{p}_x\psi = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}, \quad (9.81)$$

$$\hat{p}_x\hat{x}\psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = \frac{\hbar}{i}\left(\psi + x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right). \quad (9.82)$$

Damit folgt

$$(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\psi = i\hbar\psi. \quad (9.83)$$

Diese Gleichung gilt unabhängig von der Wellenfunktion ψ , auf welche die Operatoren wirken. D.h. für den Kommutator der beiden Operatoren \hat{x} und \hat{p}_x gilt

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar. \quad (9.84)$$

In diesem Beispiel verschwindet der Kommutator nicht, d.h. die beiden Operatoren \hat{x} und \hat{p}_x kommutieren nicht. Es sei bemerkt, dass die Operatorgleichung (9.84) ganz allgemein für kanonisch konjugierte Variablen gilt.

Im Gegensatz gibt es auch Operatoren, deren Kommutator verschwindet. Zum Beispiel gilt für die Operatoren \hat{x} und \hat{p}_y in der Ortsraumdarstellung

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] \psi = (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{p}_y\hat{x}) \psi = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial y} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} (x\psi) = 0. \quad (9.85)$$

Das Nichtverschwinden eines Kommutators hat (wie wir in Abschnitt 9.5.4 präzisieren und beweisen werden) folgende Bedeutung: Die Erwartungswerte nicht kommutierender Operatoren können nicht gleichzeitig mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden.

Diese Eigenschaft ist, wie wir auch im Zusammenhang mit der Heisenbergschen Unschärferelation (siehe Abschnitt 9.2) gesehen haben, ein wichtiger Aspekt der Quantenmechanik. In der klassischen Physik beobachten wir dieses Phänomen nie: Klassische Messgrößen kommutieren immer und sind dementsprechend gleichzeitig beliebig genau bestimmbar. Es fällt jedoch auf, dass der Kommutator der Operatoren \hat{x} und \hat{p}_x für $\hbar \rightarrow 0$ verschwindet. In diesem Grenzfall können dann x und p_x beliebig genau bestimmt werden. In diesem Grenzfall strebt auch die de Broglie Wellenlänge $\lambda = h/p$ gegen null, so dass keine Beugungserscheinungen mehr auftreten. Insbesondere verschwindet auch die rechte Seite der Heisenbergschen Unschärferelation (9.37). Aus diesen Gründen kann die klassische Mechanik als Grenzfall der Quantenmechanik für $\hbar \rightarrow 0$ betrachtet werden.

Wir behandeln noch ein weiteres Beispiel, das zeigt, dass nicht nur Operatoren, die kanonisch konjugierten Variablen entsprechen, nicht kommutieren. Es zeigt sich, dass die Operatoren der verschiedenen Komponenten des Drehimpulses nicht kommutieren. Für den Kommutator der Operatoren \hat{L}_x und \hat{L}_y erhält man

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \psi &= \frac{\hbar^2}{i^2} \left(\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial \psi}{\partial z} - z \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{i^2} \left(\left(yz \frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial x} + y \frac{\partial \psi}{\partial y} - xy \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + xy \frac{\partial^2 \psi}{\partial y \partial z} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(zy \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial z} - z^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} - xy \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + xz \frac{\partial^2 \psi}{\partial z \partial y} + x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{i^2} \left(y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) \\ &= i\hbar \hat{L}_z \psi. \end{aligned} \quad (9.86)$$

Analog ergibt sich

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x, \quad (9.87)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y. \quad (9.88)$$

Dies bedeutet, dass es nicht möglich ist, dass zwei verschiedene Komponenten des Drehimpulses gleichzeitig beliebig genau bestimmt werden können.

5. Reelle Erwartungswerte

Operatoren in der Quantenmechanik haben reelle Erwartungswerte, da physikalisch messbare Größen, sogenannte *Observable*¹, reell sind. Beispiele für Observable sind Ortskoordinaten, Impuls, Drehimpuls, Energie oder allgemein reelle Funktionen von Orts- und Impulskoordinaten.

Ein Operator \hat{F} , der einer Observablen $F(x, p)$ entspricht, muss demzufolge folgende Bedingung erfüllen

$$\langle F(x, p) \rangle = \langle F(x, p) \rangle^*, \quad (9.89)$$

d.h. der Erwartungswert muss gleich seinem konjugiert Komplexen sein. Für den Operator \hat{F} gilt daher

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{F} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi \hat{F}^* \psi^* dx. \quad (9.90)$$

Operatoren, die diese Bedingung erfüllen, werden nach C. Hermite *hermitesche oder selbstadjungierte Operatoren* genannt. Es ergibt sich also folgende Schlussfolgerung:

Jeder Observablen F entspricht ein hermitescher Operator \hat{F} .

Als Beispiel betrachten wir den Impulsoperator \hat{p}_x zur Observablen p_x und zeigen, dass \hat{p}_x hermitesch ist. Es gilt

$$\begin{aligned} \langle p_x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}_x \psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \\ &\stackrel{\text{PI}}{=} \underbrace{\frac{\hbar}{i} \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty}}_{=0} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} dx \\ &= \langle p_x \rangle^*, \end{aligned} \quad (9.91)$$

womit gezeigt ist, dass der Impulsoperator \hat{p}_x hermitesch ist. PI steht für partielle Integration.

6. Erzeugung eines hermiteschen Operators

Es stellt sich heraus, dass Operatoren zu Observablen nicht automatisch hermitesch sind. Als Beispiel betrachten wir dazu die Funktionen $F_1 = xp_x$

¹In anderen Worten: Der Begriff Observable ist ein anderer Ausdruck für eine physikalische Messgröße.

und $F_2 = p_x x$. Sie sind als Produkt aus Ortskoordinate und Impuls physikalisch deutbare Funktionen und demzufolge Observablen. Die Berechnung der Erwartungswerte $\langle xp_x \rangle$ und $\langle p_x x \rangle$ zeigt jedoch, dass weder der Operator $\hat{F}_1 = \hat{x}\hat{p}_x$ noch der Operator $\hat{F}_2 = \hat{p}_x\hat{x}$ hermitesch ist. Zudem erhält man für F_1 und F_2 unterschiedliche Erwartungswerte.

Es ist jedoch möglich, diese Operatoren zu „hermitesieren“. In unserem Beispiel ist die Hermitisierung relativ einfach: Der zu \hat{F}_1 und \hat{F}_2 gehörende hermitesche Operator lautet

$$\hat{F} = \frac{1}{2} (\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x}). \quad (9.92)$$

Im Allgemeinen kann diese Aufgabe der Hermitisierung jedoch relativ kompliziert sein.

9.4 Das zweite Postulat: Die Schrödinger-Gleichung

Ist die Wellenfunktion ψ eines Teilchens bekannt, so ist der Zustand des Teilchens vollständig charakterisiert. Insbesondere ist es möglich die Erwartungswerte beliebiger Observablen auszurechnen und somit das Verhalten des Teilchens in einem Experiment vorauszusagen. Es stellt sich nun die Frage: Wie bestimmt man die Wellenfunktion ψ eines Teilchens?

Die Antwort auf diese Frage lieferte Erwin Schrödinger² im Jahr 1926:

Postulat 2 Die Wellenfunktion $\psi(x, y, z, t)$ ist eine Lösung der Differentialgleichung

$$\hat{H}\psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}. \quad (9.93)$$

Diese Gleichung wird nach E. Schrödinger die **zeitabhängige Schrödinger-Gleichung** genannt.

Die Dynamik eines quantenmechanischen Systems wird durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung bestimmt. Die Schrödinger-Gleichung ist ein weiteres Postulat der Quantenmechanik und kann nicht hergeleitet oder bewiesen werden.

Für ein Teilchen der Masse m , das sich mit nichtrelativistischer Geschwindigkeit in einem Potential $V(x, y, z, t)$ bewegt, nimmt die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit (9.64) folgende Form an

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(x, y, z, t) + V(x, y, z, t) \psi(x, y, z, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, z, t)}{\partial t}. \quad (9.94)$$

In der Quantenmechanik tritt die Schrödinger-Gleichung an die Stelle der Newtonschen Bewegungsgleichung der klassischen Mechanik. Wir verdeutlichen diesen Zusammenhang hier an einem Beispiel.

²Erwin Schrödinger war Professor der Universität Zürich von 1921 - 1927.

Ein Teilchen der Masse m bewege sich entlang der x -Achse in einem Potential $V(x)$. Die Newtonsche Bewegungsgleichung kann geschrieben werden in der Form

$$\frac{d}{dt}p = F = -\frac{\partial V}{\partial x}. \quad (9.95)$$

Die Quantenmechanik erlaubt nur statistische Aussagen in Form von berechneten Erwartungswerten. Demzufolge würde die entsprechende Gleichung in der Quantenmechanik folgende Gestalt annehmen

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle. \quad (9.96)$$

Herleitung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle p \rangle &= \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \hat{p} \psi(x, t) dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx \\ &= \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} + \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right) dx \end{aligned} \quad (9.97)$$

Die Schrödinger-Gleichung und das konjugiert Komplexe der Schrödinger-Gleichung für unser Beispiel lauten

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x, t), \quad (9.98)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi^*(x, t). \quad (9.99)$$

Einsetzen in (9.97) liefert

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\psi^*(x, t) \right) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - V(x)\psi(x, t) \right) dx \\ &\stackrel{\text{PI}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} dx + \int_{-\infty}^{\infty} V(x)\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial \psi^*(x, t)}{\partial x} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} (V(x)\psi(x, t)) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} V(x)\psi^*(x, t) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) V(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} dx \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \frac{\partial V(x)}{\partial x} \psi(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) \left(-\frac{\partial V(x)}{\partial x} \right) \psi(x, t) dx \\ &= \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle. \end{aligned} \quad (9.100)$$

Stationäre Lösungen

Wir betrachten ein Teilchen der Masse m , das sich mit nichtrelativistischer Geschwindigkeit in einem Potential $V(x, y, z, t)$ bewegt.

Definition 9.11 *Ein Zustand, der dadurch gekennzeichnet ist, dass die Wahrscheinlichkeit $\psi^*(x, t)\psi(x, t)dx$ das Teilchen zwischen x und $x + dx$ anzutreffen nicht von der Zeit t abhängt, heisst **stationärer Zustand**.*

Ein Beispiel dafür ist die bereits mehrfach erwähnte ebene, harmonische Materiewelle

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}. \quad (9.101)$$

Allgemein hat ein stationärer Zustand die Form

$$\psi(x, t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.102)$$

In drei Dimensionen gilt

$$\psi(x, y, z, t) = u(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.103)$$

E ist die totale Energie des Teilchens, welche bei nichtrelativistischer Behandlung die Summe aus kinetischer und potentieller Energie ist

$$E = E_{\text{kin}} + V(x, y, z, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, y, z, t). \quad (9.104)$$

Wir setzen nun den Ansatz (9.103) in die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (9.93) ein, um herauszufinden, unter welchen Bedingungen sie eine Lösung ist

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\left(u(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}\right) + V(x, y, z, t)u(x, y, z)e^{-iEt/\hbar} \\ = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(u(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}\right). \end{aligned} \quad (9.105)$$

$u(x, y, z)$ ist eine Funktion der Ortskoordinaten allein, sodass

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u(x, y, z) + V(x, y, z, t)u(x, y, z)\right)e^{-iEt/\hbar} = u(x, y, z)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.106)$$

Wenn sich das Teilchen in einem zeitunabhängigen Potential $V(x, y, z)$ bewegt und somit die Gesamtenergie E konstant ist ($\partial E/\partial t = 0$) gilt

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u(x, y, z) + V(x, y, z)u(x, y, z) = Eu(x, y, z). \quad (9.107)$$

Diese Gleichung bestimmt die zeitunabhängige Funktion $u(x, y, z)$.

Ein Teilchen ist also in einem stationären Zustand, wenn seine Bewegung in einem zeitlich konstanten Potential $V(x, y, z)$ stattfindet. Für die Funktion $u(x, y, z)$ gilt dann die *zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u(x, y, z) + V(x, y, z)u(x, y, z) = Eu(x, y, z). \quad (9.108)$$

9.4.1 Eigenschaften der Lösungen

Wir gehen nun auf die Eigenschaften der Lösungen der Schrödinger-Gleichung in einer Dimension ein. Diese gelten jedoch auch in drei Dimensionen.

1. Normierbarkeit

Bei physikalischen Problemen müssen die Lösungen $\psi(x, t)$ normierbar sein

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx < \infty. \quad (9.109)$$

Da die Schrödinger-Gleichung linear und homogen ist, darf man eine Lösung mit einem Normierungsfaktor multiplizieren. In Übereinstimmung mit (9.2) wählen wir den Normierungsfaktor jeweils so, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t)\psi(x, t)dx = 1. \quad (9.110)$$

Im Fall stationärer Zustände ist $\psi(x, t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}$, so dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} u^*(x)u(x)dx = 1. \quad (9.111)$$

2. Verhalten im Unendlichen

Aus der Normierungsbedingung folgt, dass $\psi(x, t)$ und $u(x)$ mit $x \rightarrow \pm\infty$ genügend rasch gegen null streben müssen. Dasselbe gilt auch für die Ableitungen nach x .

3. Stetigkeit und Eindeutigkeit

$\psi(x, t)$ und $\partial\psi(x, t)/\partial x$ müssen für alle x stetig, eindeutig und endlich sein. Dasselbe gilt auch für $u(x)$ und $\partial u(x)/\partial x$.

Diese Eigenschaften garantieren zum Beispiel, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit und der Impuls eines Teilchens kontinuierlich mit der Koordinaten variieren.

4. Superpositionsprinzip

Da die Schrödinger-Gleichung linear und homogen ist, ist eine beliebige Linearkombination von Lösungen ebenfalls eine Lösung. D.h. sind zum Beispiel ψ_1 und ψ_2 Lösungen der Schrödinger-Gleichung, so ist $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$ ebenfalls eine Lösung.

Ausnahmefälle

Es kommt vor, dass idealisierte Beispiele und Grenzfälle einige dieser Eigenschaften nicht erfüllen. Wir geben hier zwei bekannte Beispiele an:

- Die ebene harmonische Materiewelle $\psi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}$ erfüllt die Normierungsbedingung und das geforderte Verhalten im Unendlichen nicht. Dies entspricht dem Grenzfall, bei dem Teilchen vollständig im Raum delokalisiert sind, ihre Position also völlig unbestimmt ist.
- Lösungen für physikalisch unrealistische Randbedingungen wie z.B. für das Teilchen im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden (vgl. Abschnitt 9.1.1) erfüllen die Stetigkeitsbedingungen nicht. In jeder physikalisch realistischen Situation, z.B. wenn ein Elektron durch endlich grosse elektrische Felder in einem Quantenpunkt lokalisiert ist, hat ein Potentialtopf eine endliche Höhe.

9.4.2 Beispiele von Lösungen der Schrödinger-Gleichung

Wir berechnen nun Lösungen der Schrödinger-Gleichung für einige grundlegende physikalische Probleme. Als erstes betrachten wir die Bewegung eines Teilchens in einem zeitlich und räumlich konstanten Potential. Anschliessend lösen wir das bereits in Abschnitt 9.1.1 besprochene Problem eines Teilchens in einem Potentialtopf. Wir betrachten sowohl den unendlich hohen wie auch den endlich hohen Potentialtopf. Im Anschluss besprechen wir den Tunneleffekt, den wir bei der Behandlung des Rastertunnelmikroskops (vgl. Abb. 7.2.3) kennengelernt haben. Abschliessend folgt eine kurze Diskussion der Bewegung eines Wellenpakets durch einen endlichen Potentialtopf und durch eine endliche Potentialbarriere.

Bewegung im zeitlich und räumlich konstanten Potential

Wir betrachten ein nichtrelativistisches Teilchen, das sich längs der x-Achse bewegen kann und dessen potentielle Energie V_0 räumlich und zeitlich konstant ist. Nach der klassischen Mechanik bewegt sich das Teilchen dann mit einem beliebigen, konstanten Impuls von links nach rechts oder von rechts nach links oder es bleibt irgendwo in Ruhe. Wir wollen nun herausfinden wie ein solches Problem quantenmechanisch gelöst wird.

Da das Potential V_0 zeitunabhängig ist, kommt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (9.108) zur Anwendung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + V_0 u(x) = E u(x). \quad (9.112)$$

Wir wählen den folgenden Ansatz

$$u(x) = e^{ikx}. \quad (9.113)$$

Einsetzen in (9.112) liefert

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 + V_0 = E. \quad (9.114)$$

Daraus ergibt sich

$$k_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}. \quad (9.115)$$

Somit nimmt die Funktion $u(x)$ folgende Form an

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \text{ mit } k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)}. \quad (9.116)$$

Die vollständige Wellenfunktion $\psi(x, t)$ lautet

$$\psi(x, t) = u(x)e^{-iEt/\hbar} = \left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \right) e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.117)$$

Mit $E = \hbar\omega$ und $k = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$ ist $\psi(x, t)$ die Superposition einer links- mit einer rechtslaufenden harmonischen Welle

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{i(-kx - \omega t)}. \quad (9.118)$$

Nach de Broglie gilt $k = p/\hbar = mv/\hbar$ und mit $E_{\text{kin}} = mv^2/2$ gilt $k = \sqrt{2mE_{\text{kin}}}/\hbar$. Der Vergleich mit (9.115) führt auf $E_{\text{kin}} = E - V_0$, was bestätigt, dass E der Gesamtenergie des Teilchens entspricht. Für die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ eines Teilchens mit konstantem längs der positiven x-Achse gerichteten Impuls p gilt dementsprechend

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px - Et)/\hbar}. \quad (9.119)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ nimmt dabei den konstanten Wert A^2 an. Demzufolge ist diese Wellenfunktion nicht normierbar. In diesem Fall kann die Konstante A so gewählt werden, dass sie die konstante Dichte der Teilchen entlang der x -Koordinate angibt.

Teilchen im Potentialtopf

Wir wollen nun das in Abschnitt 9.1.1 besprochene physikalische Problem eines Teilchens in einem Potentialtopf mit der Schrödinger-Gleichung lösen. D.h. wir betrachten ein Teilchen der Masse m , das sich längs der x -Achse bewegt, jedoch zwischen den Koordinaten 0 und L lokalisiert ist. Das Potential $V(x)$ hat dementsprechend die Form (vgl. Abb. 9.1)

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, \\ \infty, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (9.120)$$

Da das Potential zeitunabhängig ist, gilt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + V(x)u(x) = Eu(x). \quad (9.121)$$

Für $x < 0$ und $x > L$ ist wegen $V(x) = \infty$ $u(x) = 0$. Für $0 \leq x \leq L$ nimmt die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung folgende Form an

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) = Eu(x). \quad (9.122)$$

Wir wählen wieder den Ansatz

$$u(x) = e^{ikx}. \quad (9.123)$$

Einsetzen in 9.122 liefert

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 = E. \quad (9.124)$$

Daraus ergibt sich

$$k_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (9.125)$$

Somit nimmt die Funktion $u(x)$ folgende Form an

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \text{ mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (9.126)$$

wobei A und B die Amplituden der rechts bzw. links laufenden Wellen beschreiben. Die Berücksichtigung der Randbedingungen führt analog zu den Ausführungen in Abschnitt 9.1.1 auf die folgende Lösung³

$$\psi_n(x, t) = u(x)e^{-iE_n t/\hbar} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) e^{-iE_n t/\hbar}, & 0 \leq x \leq L, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (9.127)$$

wobei die (diskreten) Energiewerte E_n gegeben sind durch

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2 \text{ mit } n \in \mathbb{N}. \quad (9.128)$$

Die Wellenfunktionen (9.127) erfüllen nicht alle Bedingungen, die man an eine Lösung der Schrödinger-Gleichung stellt, denn die Ableitung der Wellenfunktion nach x bei $x = 0$ und $x = L$ ist unstetig. Dies ist eine Folge davon, dass das betrachtete Potential zu unphysikalischen Randbedingungen führt. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, tritt diese Schwierigkeit beim Potentialtopf mit endlicher tiefe V_0 nicht auf. Trotzdem sind die Wellenfunktionen (9.127) durchaus sinnvoll, wenn man sie als Grenzfall $V_0 \rightarrow \infty$ betrachtet.

Teilchen in endlichem Potentialtopf

Wir kommen nun vom Spezialfall $V_0 = \infty$ zum allgemeinen Fall $V_0 \neq \infty$. Wir betrachten ein Teilchen mit Masse m , das sich in einem zeitlich konstanten Potential

³Der Faktor i ist ein nichtrelevanter Phasenfaktor und wurde deshalb gegenüber der Formulierung (9.14) vernachlässigt.

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < a, \\ V_0, & |x| > a, \end{cases} \quad (9.129)$$

welches die Gestalt eines symmetrischen Topfes der Tiefe V_0 hat (vgl. Abb. 9.5), bewegt. Die Gesamtenergie des Teilchens sei E .

Wir betrachten zuerst die *klassischen* Erwartungen und unterscheiden dabei die Fälle $E < V_0$ und $E > V_0$:

1. $E < V_0$: Da die kinetische Energie positiv sein muss, kann sich das Teilchen nur innerhalb des Topfes aufhalten. Es bewegt sich zwischen den Umkehrpunkten $\pm a$ hin und her.
2. $E > V_0$: Das Teilchen kann den Topf durchqueren und sich auch ausserhalb desselben aufhalten.

Wir kommen nun zur **quantenmechanischen** Behandlung für den Fall dass $E < V_0$, d.h. wenn das Teilchen im Potentialtopf lokalisiert ist. Wir unterteilen die x-Achse in drei Bereiche I, II und III (vgl. Abb. 9.5) für die wir die zeitunabhängige (Potential ist zeitunabhängig) Schrödinger-Gleichung separat lösen.

- In der Region I nimmt das Potential den Wert V_0 an und daher lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_I(x) + V_0 u_I(x) = E u_I(x). \quad (9.130)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist

$$u_I(x) = A_1 e^{k'x} + A'_1 e^{-k'x} \text{ mit } k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (9.131)$$

Da die Lösung für $x \rightarrow -\infty$ endlich sein muss gilt $A'_1 = 0$ und wir erhalten

$$u_I(x) = A_1 e^{k'x} \text{ mit } k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (9.132)$$

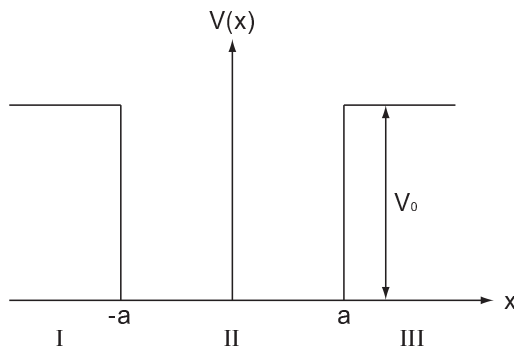


Abb. 9.5: Das Potential $V(x)$ in Abhängigkeit von x für ein Teilchen im endlichen Potentialtopf. Die x-Achse wird für die Berechnungen in drei Teilgebiete I, II und III unterteilt.

- In der Region II verschwindet das Potential und daher lautet die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{II}}(x) = E u_{\text{II}}(x). \quad (9.133)$$

Die Lösung dieser Gleichung ist

$$u_{\text{II}}(x) = A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx} \text{ mit } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}. \quad (9.134)$$

- Analog zu Region I ergibt sich für die Region III die Lösung

$$u_{\text{III}}(x) = A_3' e^{-k'x} \text{ mit } k' = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}. \quad (9.135)$$

Aus den Stetigkeitsbedingungen für die Wellenfunktion und deren Ableitung nach x an den Stellen $x = \pm a$ ergeben sich die folgenden Gleichungen zur Bestimmung der Amplituden und Energiewerte

$$u_{\text{I}}(-a) = u_{\text{II}}(-a) \rightarrow A_1 e^{-k'a} = A_2 e^{-ika} + A_2' e^{ika}, \quad (9.136)$$

$$\frac{\partial u_{\text{I}}(-a)}{\partial x} = \frac{\partial u_{\text{II}}(-a)}{\partial x} \rightarrow k' A_1 e^{-k'a} = ik A_2 e^{-ika} - ik A_2' e^{ika}, \quad (9.137)$$

$$u_{\text{II}}(a) = u_{\text{III}}(a) \rightarrow A_2 e^{ika} + A_2' e^{-ika} = A_3' e^{-k'a}, \quad (9.138)$$

$$\frac{\partial u_{\text{II}}(a)}{\partial x} = \frac{\partial u_{\text{III}}(a)}{\partial x} \rightarrow ik A_2 e^{ika} - ik A_2' e^{-ika} = -k' A_3' e^{-k'a}. \quad (9.139)$$

In Matrixschreibweise lautet dieses Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} e^{-k'a} & 0 & -e^{-ika} & -e^{ika} \\ k' e^{-k'a} & 0 & -ik e^{-ika} & ik e^{ika} \\ 0 & e^{-k'a} & -e^{ika} & -e^{-ika} \\ 0 & k' e^{-k'a} & ik e^{ika} & -ik e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_3' \\ A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = 0. \quad (9.140)$$

Elementare Zeilenumformungen für lineare Gleichungssysteme liefern

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{-k'a} & 0 & -e^{-ika} & -e^{ika} \\ 0 & e^{-k'a} & -e^{ika} & -e^{-ika} \\ 0 & 0 & (k' - ik) e^{-ika} & (k' + ik) e^{ika} \\ 0 & 0 & (k' + ik) e^{ika} & (k' - ik) e^{-ika} \end{pmatrix}}_{=M} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_3' \\ A_2 \\ A_2' \end{pmatrix} = 0. \quad (9.141)$$

Nichttriviale Lösungen ergeben sich für $\det(M) = 0$. Daraus ergibt sich

$$\frac{(k' - ik)^2}{(k' + ik)^2} = e^{4ika}. \quad (9.142)$$

Wir unterscheiden hier **zwei Fälle**

$$\frac{k' - ik}{k' + ik} = e^{2ika}, \quad (9.143)$$

$$\frac{k' - ik}{k' + ik} = -e^{2ika} \quad (9.144)$$

die symmetrischen und antisymmetrischen Wellenfunktionen entsprechen. Wir berechnen separat die Amplituden der Wellenfunktionen in den drei Regionen und die sich daraus ergebenden möglichen Energiewerte.

1. Antisymmetrischer Fall

Wir setzen $A'_2 \equiv C$ und bestimmen mit (9.141) schrittweise die weiteren Amplituden. Für A_2 erhalten wir mit (9.143)

$$A_2 = -C \frac{k' + ik}{k' - ik} e^{2ika} = -C. \quad (9.145)$$

Wir erhalten also für den ersten Fall für den Bereich II antisymmetrische Wellenfunktionen. Daher nennen wir diesen Fall *antisymmetrisch*. Für A'_3 und A_1 ergibt sich

$$A'_3 = \frac{A_2 e^{ika} + A'_2 e^{-ika}}{e^{-k'a}} = -C \frac{e^{ika} - e^{-ika}}{e^{-k'a}} = -2iC \sin(ka) e^{k'a}, \quad (9.146)$$

$$A_1 = -A'_3 = 2iC \sin(ka) e^{k'a}. \quad (9.147)$$

Die Wellenfunktionen für die drei Bereiche I, II und III nehmen dementsprechend die folgende Form an

$$u_{\text{I}}(x) = 2iC \sin(ka) e^{k'(a+x)}, \quad (9.148)$$

$$u_{\text{II}}(x) = -C e^{ikx} + C e^{-ikx} = -2iC \sin(kx), \quad (9.149)$$

$$u_{\text{III}}(x) = -2iC \sin(ka) e^{k'(a-x)}. \quad (9.150)$$

Die verbleibende Unbekannte C erhalten wir aus der Normierungsbedingung. Es gilt

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{-a} |u_{\text{I}}(x)|^2 dx + \int_{-a}^a |u_{\text{II}}(x)|^2 dx + \int_a^{\infty} |u_{\text{III}}(x)|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{-a} 4C^2 \sin^2(ka) e^{2k'(a+x)} dx + \int_{-a}^a 4C^2 \sin^2(kx) dx \\ &\quad + \int_a^{\infty} 4C^2 \sin^2(ka) e^{2k'(a-x)} dx \\ &= \frac{4C^2 \sin^2(ka)}{2k'} + \frac{4C^2}{k} (ka - \sin(ka) \cos(ka)) + \frac{4C^2 \sin^2(ka)}{2k'} \\ &= 4C^2 \left(\frac{\sin^2(ka)}{k'} + \frac{ka - \sin(ka) \cos(ka)}{k} \right). \end{aligned} \quad (9.151)$$

Daraus ergibt sich für die Konstante C

$$C = \frac{1}{2} \left(\frac{\sin^2(ka)}{k'} + \frac{ka - \sin(ka) \cos(ka)}{k} \right)^{-1/2}. \quad (9.152)$$

Damit ist die Wellenfunktion für das Teilchen im endlichen Potentialtopf im antisymmetrischen Fall bestimmt.

Es bleibt noch die Frage zu klären, welche Energiewerte für das Teilchen erlaubt sind. Wir formen dazu die Gleichung (9.143) um, sodass wir eine transzendente Gleichung erhalten, die wir graphisch lösen können. In einem ersten Schritt ersetzen wir k und k' in (9.143) durch die Ausdrücke in (9.132) und (9.134). Wir erhalten somit

$$\begin{aligned} e^{2i\sqrt{2mE}a/\hbar} &= \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)} - i\sqrt{2mE}}{\sqrt{2m(V_0 - E)} + i\sqrt{2mE}} \\ &= \frac{\left(\sqrt{2m(V_0 - E)} - i\sqrt{2mE}\right)^2}{2mV_0} \\ &= 1 - \frac{2E}{V_0} - i\frac{\sqrt{4E(V_0 - E)}}{V_0}. \end{aligned} \quad (9.153)$$

Wir schreiben nun auch die linke Seite der Gleichung als Summe von Real- und Imaginärteil

$$\cos(2\sqrt{2mE}a/\hbar) + i\sin(2\sqrt{2mE}a/\hbar) = 1 - \frac{2E}{V_0} - i\frac{\sqrt{4E(V_0 - E)}}{V_0}. \quad (9.154)$$

Gleichsetzen der Real- und Imaginärteile ergibt folgendes Gleichungssystem

$$\cos(2\sqrt{2mE}a/\hbar) = 1 - \frac{2E}{V_0}, \quad (9.155)$$

$$\sin(2\sqrt{2mE}a/\hbar) = -\frac{\sqrt{4E(V_0 - E)}}{V_0}. \quad (9.156)$$

Wir benützen die Additionstheoreme $\cos(2x) = 1 - 2\sin^2 x$ und $\sin(2x) = 2\sin x \cos x$ und erhalten

$$2\sin^2(\sqrt{2mE}a/\hbar) = \frac{2E}{V_0}, \quad (9.157)$$

$$2\sin(\sqrt{2mE}a/\hbar)\cos(\sqrt{2mE}a/\hbar) = -\frac{\sqrt{4E(V_0 - E)}}{V_0}. \quad (9.158)$$

Division von (9.158) durch (9.157) ergibt

$$-\cot(\sqrt{2mE}a/\hbar) = \frac{\sqrt{E(V_0 - E)}}{E}. \quad (9.159)$$

Wir führen nun die Konstant $\xi \equiv \sqrt{2mV_0}a/\hbar$ ein. Damit ergibt sich das folgende Resultat

$$-\cot(ka) = \frac{\sqrt{\xi^2 - (ka)^2}}{ka} \quad \text{mit } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (9.160)$$

Dies ist die zu Beginn erwähnte transzendente Gleichung, die wir nun graphisch lösen. Dazu setzen wir $z \equiv ka$ und tragen die Funktionen

$f_1(z) = -\cot z$ und $f_2 = \sqrt{\xi^2 - z^2}/z$ auf, siehe Abb. 9.6. Die erlaubten Werte von z ergeben sich aus den Schnittpunkten dieser beiden Kurven. Die Anzahl antisymmetrischer Lösungen n_a hängt von ξ ab. Dabei gilt folgende Gesetzmässigkeit: Wenn

$$\frac{\pi}{2}(2n_a - 1) < \xi < \frac{\pi}{2}(2n_a + 1), \quad (9.161)$$

dann besitzt (9.160) genau n_a Lösungen. Insbesondere wird daraus ersichtlich, dass antisymmetrische Lösungen nur dann existieren, wenn $\xi > \pi/2$, d.h. wenn gilt

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}. \quad (9.162)$$

Das Potential V_0 muss also einen minimalen Wert aufweisen. Die z entsprechenden Energiewerte E ergeben sich aus

$$E = \frac{z^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (9.163)$$

2. Symmetrischer Fall

Da der symmetrische Fall analog zum antisymmetrischen Fall gelöst wird, werden wir uns im Wesentlichen auf die Angabe der Resultate beschränken. Wir setzen wiederum $A'_2 \equiv C$ und bestimmen mit (9.141) schrittweise die weiteren Amplituden. Für A_2 erhalten wir mit (9.144)

$$A_2 = C. \quad (9.164)$$

Wir erhalten also für den Bereich II symmetrische Wellenfunktionen. Daher nennen wir diesen Fall *symmetrisch*. Für A'_3 und A_1 ergibt sich

$$A'_3 = 2C \cos(ka) e^{k'a}, \quad (9.165)$$

$$A_1 = -2C \cos(ka) e^{k'a}. \quad (9.166)$$

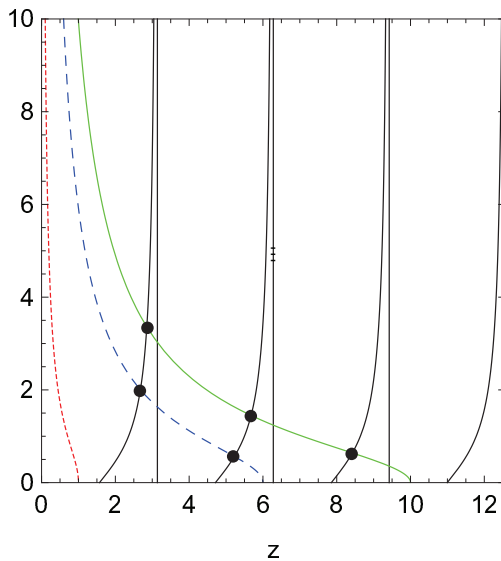


Abb. 9.6: Graphische Lösung der transzendenten Gleichung (9.160) für verschiedene Werte von ξ . Die Funktion f_1 entspricht der schwarzen durchgezogenen Linie, die Funktion f_2 ist durch die rot gestrichelte (ξ_1), blau gestrichelte (ξ_2) und grün durchgezogene Linie (ξ_3) dargestellt, wobei $\xi_1 < \xi_2 < \xi_3$.

Die Wellenfunktionen für die drei Bereiche I, II und III nehmen dementsprechend die folgende Form an

$$u_{\text{I}}(x) = -2C \cos(ka) e^{k'a} e^{k'(a+x)}, \quad (9.167)$$

$$u_{\text{II}}(x) = 2C \cos(kx), \quad (9.168)$$

$$u_{\text{III}}(x) = 2C \cos(ka) e^{k'(a-x)}. \quad (9.169)$$

Die verbleibende Unbekannte C erhalten wir aus der Normierungsbedingung. Analog zu den Berechnungen beim antisymmetrischen Fall ergibt sich für die Konstante C

$$C = \frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2(ka)}{k'} + \frac{ka + \sin(ka) \cos(ka)}{k} \right)^{-1/2}. \quad (9.170)$$

Damit ist die Wellenfunktion für das Teilchen im endlichen Potentialtopf auch im symmetrischen Fall bestimmt. Ebenfalls ergibt sich auf analoge Weise eine transzendente Gleichung zur Bestimmung der Energiewerte

$$\tan(ka) = \frac{\sqrt{\xi^2 - (ka)^2}}{ka} \quad \text{mit} \quad \xi \equiv \sqrt{2mV_0}a/\hbar \quad \text{und} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (9.171)$$

Für die graphische Lösung setzen wir wiederum $z \equiv ka$ und tragen die Funktionen $f_1(z) = \tan z$ und $f_2 = \sqrt{\xi^2 - z^2}/z$ auf, siehe Abb. 9.7. Die erlaubten Werte von z ergeben sich aus den Schnittpunkten dieser beiden Kurven. Die Anzahl symmetrischer Lösungen n_s ist gegeben durch

$$n_s = \left[\frac{\xi}{\pi} \right], \quad (9.172)$$

wobei [...] auf die nächsthöhere ganze Zahl rundet. Somit existiert für $\xi > 0$ im Gegensatz zum antisymmetrischen Fall auf jeden Fall mindestens eine Lösung. Die z entsprechenden Energiewerte E ergeben sich wiederum aus (9.163).

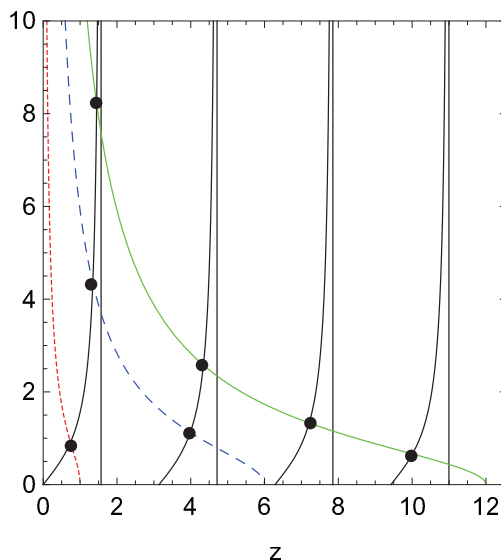


Abb. 9.7: Graphische Lösung der transzendenten Gleichung (9.171) für verschiedene Werte von ξ . Die Funktion f_1 entspricht der schwarzen durchgezogenen Linie, die Funktion f_2 ist durch die rot gepunktete (ξ_1), blau gestrichelte (ξ_2) und grün durchgezogene Linie (ξ_3) dargestellt, wobei $\xi_1 < \xi_2 < \xi_3$.

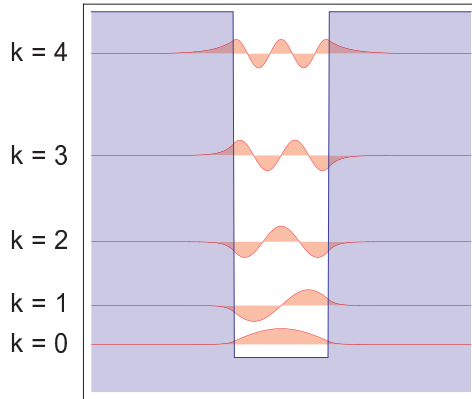


Abb. 9.8: Numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktionen für die Knotenzahlen k von 0 bis 4.

Zum Abschluss formulieren wir einige **Schlussfolgerungen** und zusammenfassende Bemerkungen:

- Fassen wir die beiden Fälle zusammen, so ergeben sich für ein festes Potential V_0 und damit für ein festes ξ

$$\left\lfloor \frac{2\xi}{\pi} \right\rfloor + 1 \quad (9.173)$$

diskrete Zustände, die das Teilchen besetzen kann. $\lfloor \dots \rfloor$ rundet auf die nächstkleinere ganze Zahl ab. Zum Beispiel ergeben sich für ein Potential mit $\xi = 5$: 4 Zustände, 2 antisymmetrische und 2 symmetrische.

- Die symmetrischen und antisymmetrischen Zustände wechseln einander mit wachsender Energie und Knotenzahl⁴ ab. Die Knotenzahl im symmetrischen Grundzustand ist null und steigt bei jedem höheren Zustand um eins. Sie bietet daher eine Möglichkeit, die Zustände zu nummerieren.
- In Abb. 9.8 ist eine numerische Lösung der Schrödinger-Gleichung für die Wellenfunktionen für die Knotenzahlen k von 0 bis 4 dargestellt.
- Im Vergleich zu den zu Beginn aufgeführten klassischen Betrachtungen ergibt sich folgender wichtige Unterschied: Auch bei $E < V_0$ besteht eine nichtverschwindende Wahrscheinlichkeit das Teilchen ausserhalb des Topfes (in den Gebieten I und III) anzutreffen.

Der Tunneleffekt

Wir betrachten ein Teilchen mit kinetischer Energie E , welches auf eine Potentialbarriere der Höhe $V_0 > E$ und der Breite L trifft (vgl. Abb. 9.9). Nach den Regeln der klassischen Physik kann das Teilchen die Barriere nicht überwinden. Quantenmechanisch kann ein Teilchen jedoch eine Potentialbarriere durchdringen und sich auf der anderen Seite der Barriere weiter fortbewegen.

⁴Die Knotenzahl entspricht der Anzahl Nullstellen der Wellenfunktion