

Reinhard Weiß

Quantenobjekt – Schrödinger-Gleichung –  
Tunneleffekt

19.01.2025

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Fourier-Transformation</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Allgemeines zur Quantenmechanik</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Schrödinger-Gleichung, Materiewellenfunktion</b>	<b>11</b>
3.1	Plausibilisierung der Schrödinger-Gleichung . . . . .	11
3.2	Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung . . . . .	13
3.3	Stationäre Schrödinger-Gleichung . . . . .	14
<b>4</b>	<b>Das freie quantenmechanische Teilchen</b>	<b>18</b>
4.1	Wellenfunktion des freien Teilchens . . . . .	19
4.2	Materiewellenpaket und Teilchenunschärfe . . . . .	23
4.3	Breitfließen (Dispersion) des Gauß'schen Wellenpakets . . . . .	26
<b>5</b>	<b>Quantenmechanische Teilchen im eindimensionalen unendlich hohen Potentialtopf und das Volumen der zweidimensionalen Phasenraumzelle</b>	<b>31</b>
<b>6</b>	<b>Quantenmechanisches Teilchen mit endlichem, stückweise konstantem Potential</b>	<b>40</b>
6.1	Potentialbarriere – Tunneleffekt . . . . .	42
6.2	Raster-Tunnel-Mikroskopie . . . . .	49
<b>7</b>	<b>Anhang</b>	<b>53</b>

## Quellen

- Martin Bäker, Die Schrödingergleichung - Teil I bis Teil VIII, Das Ende der Schrödingergleichung  
[http://scienceblogs.de/hier-wohnen-drachen/...](http://scienceblogs.de/hier-wohnen-drachen/)
- Gregor Diezmann, PC II-Quantenmechanik, Universität Mainz, 9. November 2016  
[https://www.blogs.uni-mainz.de/fb09-theoretische-chemie/files/2018/08/PC2\\_Skript\\_11\\_2016.pdf](https://www.blogs.uni-mainz.de/fb09-theoretische-chemie/files/2018/08/PC2_Skript_11_2016.pdf)

Im vorliegende Skript werden einige grundlegende Standardthemen der Wellenmechanik mathematisch behandelt und vollständig durchgerechnet. Die vollständigen Rechenwege fehlen nämlich meistens in Lehrbüchern und Vorlesungsskripten, weil sie kurzerhand in die Übungen „verbannt“ werden. Insofern ist dieses Skript vielleicht für einige Physikstudenten eine kleine Starthilfe in die Quantenmechanik.

## Achtung!

Lange Rechnungen, die nicht unbedingt zum Verständnis beitragen, haben wir zur besseren Übersicht in den Anhang verlegt.

# 1 Fourier-Transformation

Wir werden hier die Fourier-Transformation in der folgenden Notation verwenden:

$$\text{Hintransformation:} \quad \tilde{\Psi}(k, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dt \Psi(x, t) e^{-i(kx - \omega t)},$$

$$\text{Rücktransformation:} \quad \Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{\Psi}(k, \omega) e^{i(kx - \omega t)}.$$

$$\text{Hintransformation:} \quad \Phi(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, t) e^{-ikx} \quad (1.1)$$

$$\text{bzw.} \quad \Phi(k, 0) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, 0) e^{-ikx}. \quad (1.2)$$

$$\text{Rücktransformation:} \quad \Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \Phi(k, t) e^{ikx} \quad (1.3)$$

$$\text{bzw.} \quad \Psi(x, 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \Phi(k, 0) e^{ikx}. \quad (1.4)$$

$$\text{Parseval'sches Theorem:} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx |f(x)|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk |\tilde{f}(k)|^2. \quad (1.5)$$

Die Fourier-Transformierte wird also ggf. durch eine Tilde über dem Symbol der Ausgangsfunktion gekennzeichnet.

Periodische Funktionen lassen sich in eine **Fourier-Reihe** entwickeln, also in der Praxis durch eine Fourier-Reihe annähern. Das geschieht, indem man verschiedene Sinus- und Kosinus-Funktionen, also im Prinzip ebene Wellen verschiedener Wellenlänge bzw. Periode und verschiedener Amplitude  $A$  geschickt überlagert:

$$f(x) = \sum_n A_n e^{ik_n x}. \quad (1.6)$$

Die **Fourier-Koeffizienten**  $A_n$  bilden dann ein **diskretes Amplitudenspektrum**.

Aperiodische Funktionen lassen sich nicht durch Fourier-Reihenentwicklung darstellen. Wenn man aber die Periode der zur Reihenentwicklung verwendeten Sinus- und Kosinus-Funktionen gegen unendlich gehen lässt, wird in (1.6) das Amplitudenspektrum kontinuierlich und die Summe geht in ein Integral über, das **Fourier-Integral**:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{A}(k) e^{ikx}.$$

Das **kontinuierliche Amplitudenspektrum** oder besser gesagt, die **Amplitudenfunktion**  $\tilde{A}(k)$  heißt die Fourier-Transformierte von  $f(x)$ . Mit Hilfe des Fourier-Integrals bzw. der Fourier-Transformation lassen sich also aperiodische Funktionen darstellen.

Weil der Weg von der Fourier-Reihe zum Fourier-Integral in der Literatur meistens als bekannt vorausgesetzt wird, obwohl er dies oft nicht ist, wollen wir ihn hier kurz skizzieren. Die dafür erforderliche Herleitung der komplexen Fourier-Reihe findet man in sehr „übersichtlicher“ Form z.B. im Lehr- und Übungsbuch Mathematik V für Elektrotechniker, Fachbuchverlag Leipzig, Köln, 1992, Seite 215 bis Seite 217. Und alles Wesentliche zur Fourier-Transformation wird sehr schön illustriert im Buch von Tilman Butz, Fouriertransformation für Fußgänger, 7. Aufl., Vieweg und Teubner, 2011. Aber auch im Internet findet inzwischen jeder das Seine.

Wir gehen also aus von der komplexen Form der Fourier-Reihe

$$f(x) = \sum_n A_n e^{in \frac{2\pi}{L} x} = \sum_n A_n e^{ik_n x}$$

mit den Fourier-Koeffizienten  $A_n = \frac{1}{L} \int_L dx f(x) e^{-ik_n x}$ .

Die dabei vorkommenden Größen sind

der Laufindex  $n \in \mathbb{Z}$ ,

die Periode  $L \simeq \lambda$  der zu entwickelnden periodischen Funktion  $f(x)$  und

die Wellenzahlen  $k_n = n \cdot 2\pi/L$  der zur Reihenentwicklung verwendeten Sinus- und Kosinus-Funktionen.

Ausgeschrieben lautet die komplexe Fourier-Reihe

$$f(x) = \sum_n \left[ \underbrace{\frac{1}{L} \int_L f(x) e^{-ik_n x} dx}_{\rightarrow \tilde{A}(k)} \right] e^{ik_n x} . \quad (1.7)$$

Die „Feinheit der Unterteilung“ der Reihe wird bestimmt durch

$$\Delta k = (n+1) \cdot \frac{2\pi}{L} - n \cdot \frac{2\pi}{L} = \frac{2\pi}{L}$$

$$\iff \frac{1}{L} = \frac{\Delta k}{2\pi} .$$

Wenn wir die „Unterteilung“ jetzt beliebig fein machen, resultiert

$$\Delta k \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad k_n \rightarrow k ,$$

d. h., die „Unterteilung“ geht über in ein Kontinuum.  $\Delta k \rightarrow 0$  bedeutet aber, dass die Periode der zur Reihenentwicklung verwendeten Sinus- und Kosinus-Funktionen gegen unendlich geht, was aber nur sinnvoll ist, wenn auch die Periode  $L$  der zu entwickelnden Funktion  $f(x)$  gegen unendlich geht.  $f(x)$  geht damit über in eine aperiodische Funktion und wir können schreiben:

$$\Delta k \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad L \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{L} = \frac{\Delta k}{2\pi} \xrightarrow{\Delta k \rightarrow 0} \frac{dk}{2\pi} .$$

Damit wird die komplexe Fourier-Reihe (1.7) gemäß

$$\sum_n \frac{1}{L} \dots \xrightarrow{\Delta k \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \dots = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \dots$$

zum **Fourier-Integral**

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{A}(k) e^{ikx} \quad (1.8)$$

mit

$$\tilde{A}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) e^{-ikx} . \quad (1.9)$$

(1.9) ist die Fourier-(Hin-)Transformation, (1.8) demzufolge die Fourier-Rücktransformation und  $\tilde{A}(k)$  ist die Fourier-Transformierte von  $f(x)$ .

## 2 Allgemeines zur Quantenmechanik

- Die Quantenmechanik (Abk. QM) beschreibt das Verhalten von Quantenobjekten, mikroskopisch kleinen Teilchen von Elementarteilchen bis hin zu mittelgroßen Molekülen. **Quantenobjekte** besitzen also eine räumliche Ausdehnung (Länge, Durchmesser) von  $\leq 1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$ . Hier einige Zahlen zum Vergleich:

Durchmesser von Atomen	$\approx 0,1 \text{ nm bis } 0,5 \text{ nm}$ ,
Durchmesser des Influenzavirus	$\approx 100 \text{ nm}$ ,
Durchmesser von Staphylococcus aureus (Eiterbakterium)	$\approx 1000 \text{ nm}$ ,
Wellenlänge des sichtbaren Lichts	$380 \text{ nm bis } 780 \text{ nm}$ .

Die QM ist folglich keine Naturwissenschaft zum „Sehen und Anfassen“. Sie ist das Gebiet der Physik mit der größten „Genauigkeit“. Vieles in unserem Alltag wäre ohne die Erkenntnisse aus der QM nicht möglich, wie z. B. die Halbleitertechnik und die Elektronik. Eine interessante Anwendung der QM ist die Elektronenmikroskopie. Und zwar ist diese deshalb so interessant, weil hier wegen der hohen Elektronengeschwindigkeiten die spezielle Relativitätstheorie berücksichtigt werden muss. Das gleiche gilt dann natürlich auch für die Elementarteilchenbeschleuniger.

Schrödingers Katze (als Ganzes) ist ein makroskopisches Objekt, also eigentlich kein quantenmechanisches Objekt. Und bekanntlich interferieren Katzen (fast) nicht, was man von Quantenobjekten erwarten dürfte. Insofern ist Schrödingers Katze ein hinkendes Beispiel, das dazu geeignet ist, mehr Verwirrung als Klarheit zu stiften.

- Die QM wurde maßgeblich von Werner Heisenberg (1901–1976), Erwin Schrödinger (1876–1961) und Paul Dirac<sup>1</sup> (1902–1984) entwickelt, wobei jeder von einem anderen Ansatz ausging. Deshalb nennt man Heisenbergs QM auch Matrizenmechanik (ca. 1925) und Schrödingers QM die Wellenmechanik (**Schrödinger-Gleichung 1926**). Diracs QM (ca. 1926) verbindet die Ansätze von Heisenberg und Schrödinger in gewisser Weise. Heisenberg-Bild, Schrödinger-Bild und Dirac-Bild der QM sind aber äquivalent und deshalb letztlich ineinander überführbar.

Wir werden im Folgenden für den Begriff Schrödinger-Gleichung die Abkürzung **SGL** verwenden.

- Quantenmechanische Teilchen leben im **Phasenraum**, zusammengesetzt aus Impuls- und Ortsraum, und können folglich beschrieben werden durch ihre Phasenraumvektoren

$$\vec{\pi} = (\vec{p}(t), \vec{r}(t)) = (p_x(t), p_y(t), p_z(t), x(t), y(t), z(t)) .$$

Der Phasenraum eines Einteilchensystems ist 6-dimensional, der eines  $N$ -Teilchensystems  $6N$ -dimensional. Ort  $\vec{r}$  und Impuls  $\vec{p}$  eines Teilchens müssen nicht unbedingt abhängig sein von der Zeit  $t$ .

---

<sup>1</sup>Dirac war bekennender Atheist, sodass sich Wolfgang Pauli einmal dazu wie folgt geäußert haben soll: „Es gibt keinen Gott und Paul Dirac ist sein Prophet.“

- Die **Planck-Einstein-Beziehung**

$$E = h \cdot \nu$$

beschreibt die Energie  $E$  eines Quants (Teilchens, kleinstmöglichen Energiepakets) von Licht bzw. allgemein von elektromagnetischen Wechselfeldern der Frequenz  $\nu$ . Der Proportionalitätsfaktor

$$\text{Planck'sches Wirkungsquantum } h = 6,626\,070\,15 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$$

ist eine fundamentale Naturkonstante. Lichtquanten heißen Photonen.

- Die **de Broglie-Beziehung** beschreibt den Zusammenhang zwischen dem Impuls eines Quantenobjekts und seiner Materiewellenlänge bzw. seiner de Broglie-Wellenlänge  $\lambda$ . Mit dem reduzierten Planck'schen Wirkungsquantum  $\hbar = h/(2\pi)$  und der Wellenzahl  $k = 2\pi/\lambda$  gilt also

$$\text{de Broglie-Beziehung } \vec{p} = \vec{p}(\lambda) = \hbar \vec{k} \iff \frac{h}{p} = \lambda \text{ de Broglie-Wellenlänge.}$$

Wenn die Vektorschreibweise nicht erforderlich ist, benutzt man den Impulsbetrag  $p = |\vec{p}|$  und den Betrag des Wellenvektors  $\vec{k}$ , d. h. die Wellenzahl  $k = |\vec{k}|$ . Für (ruhemasselose) Photonen mit der Frequenz  $\nu = c/\lambda$  bzw. der Kreisfrequenz  $\omega = 2\pi\nu$  und der Energie  $E = \hbar\omega = h\nu = hc/\lambda$  liefert die de Broglie-Beziehung

$$E = \frac{h}{\lambda} \cdot c = p \cdot c. \quad (2.1)$$

Weil Photonen sich im Vakuum mit der Lichtgeschwindigkeit  $c$  bewegen, ist  $p$  in (2.1) der relativistische Impuls.

Durch die Anwendung sowohl der Planck-Einstein-Beziehung als auch der Einstein'schen Masse-Energie-Äquivalenz  $E = mc^2$  auf ein Photon (Index ph) lässt sich die de Broglie-Beziehung wie folgt plausibilisieren:

$$\begin{aligned} E_{\text{ph}} = m \cdot c^2 = h \cdot \nu = \hbar\omega &\iff m = \frac{\hbar\omega}{c^2} \implies \\ p_{\text{ph}} = m \cdot c = \frac{\hbar\omega}{c^2} \cdot c = \hbar\omega \cdot \frac{1}{c} &\quad \left| \quad c \iff v = \frac{\lambda}{T} = \lambda\nu = \frac{\omega}{k} \right. \\ \implies p = m \cdot v = \hbar\omega \cdot \frac{1}{v} = \hbar\omega \cdot \frac{k}{\omega} = \hbar k. &\quad \square \end{aligned}$$

- Die **Energie-Impuls-Beziehung** für ein nichtrelativistisches freies Teilchen der Masse  $m$  ist

$$E = E(\nu) = h\nu = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{m^2 v^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2. \quad (2.2)$$

Darin ist  $\omega = 2\pi\nu$  die Kreisfrequenz. Die Frequenz und folglich auch die Kreisfrequenz können nur positive Werte annehmen gemäß  $\nu \geq 0$  und  $\omega \geq 0$ . Nichtrelativistisch, d. h. im Fall  $v \ll c$ , wird für  $m$  die Ruhemasse des Teilchens verwendet. Durch Äquivalenzumformung erhalten wir aus (2.2) die für Physiker wichtige **Dispersionsrelation**

$$\omega = \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (\text{in der Schrödinger-Gleichung}).$$

(Ruhemasselose) Photonen bzw. elektromagnetische Wellen im Vakuum zeigen keine Dispersion, denn für sie gilt

$$\omega = c \cdot k \quad (\text{in Maxwell'schen Gleichungen, Vakuumlichtgeschwindigkeit } c = \text{const}).$$

- Die SGL enthält den **Hamilton-Operator** (Hamiltonian)  $\hat{H}$ , ein hermitescher Operator, der im Allgemeinen auf den Hilbertraum wirkt. Der **Hilbertraum** im eigentlichen Sinne ist ein abzählbarer, unendlichdimensionaler komplexer Vektorraum zur Beschreibung der Zustände quantenmechanischer Systeme. Im Allgemeinen sind deshalb die Lösungen der SGL komplexwertige Funktionen. Die zu diesen Lösungen **komplex Konjugierten** indizieren wir mit einem Stern wie beispielsweise  $\Psi \rightarrow \Psi^*$ .

- Die **Heisenberg'sche Unschärferelation** umfasst nicht nur die

$$\text{Impuls-Orts-Unschärfe} \quad \Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2},$$

sondern auch die

$$\text{Energie-Zeit-Unschärfe} \quad \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Die „Verwandtschaft“ zwischen Impuls-Orts-Unschärfe und Energie-Zeit-Unschärfe zeigt sich beispielsweise in der Phase  $kx - \omega t$  der Darstellung einer Materiewelle. Mit

$$p = p(k(\lambda)) = \hbar k \quad \Leftrightarrow \quad k = \frac{1}{\hbar} p \quad \text{und}$$

$$E = E(\nu) = h \cdot \nu = \hbar 2\pi \cdot \frac{\omega}{2\pi} = \hbar \omega \quad \Leftrightarrow \quad \omega = \frac{1}{\hbar} E$$

erhält die Phase nämlich die folgende Gestalt:

$$kx - \omega t \quad \longrightarrow \quad \frac{1}{\hbar} px - \frac{1}{\hbar} Et.$$

Wegen der Heisenberg'schen Unschärfe „bewohnt“ jedes Teilchen im Phasenraum ein Phasenraumvolumen, dessen Größe einen bestimmten Wert nicht unterschreiten kann. Dieser kleinstmögliche Phasenraumbereich heißt **Phasenraumzelle** und hat für ein quantenmechanisches  $N$ -Teilchensystem im 3-dimensionalen Orts- und im 3-dimensionalen Impulsraum das Phasenraumvolumen

$$(2\pi\hbar)^{3N} = h^{3N}$$

bzw.  $h^3$  für das Einteilchensystem. Das Phasenraumzellenvolumen spielt eine wichtige Rolle in der statistischen Physik bzw. Thermodynamik. Die Dimension des Wirkungsquantums  $h$  bzw. der Wirkung ist

$$\text{Wirkung} = \text{Energie} \cdot \text{Zeit} = \text{Impuls} \cdot \text{Länge}$$

und ist somit konsistent z. B. mit dem Phasenraumzellenvolumen im Einteilchensystem  $h^3 \Rightarrow \text{Impuls}^3 \cdot \text{Länge}^3 = \text{Impulsraumvolumen} \cdot \text{Ortsraumvolumen}$ .

Die 3 Freiheitsgrade im 3-dimensionalen Ortsraum mit den 3 Freiheitsgraden im zugehörigen 3-dimensionalen Impulsraum liefern zusammen 6 Phasenraumkoordinaten für jedes Teilchen. Demzufolge ist der daraus resultierende Phasenraum für ein  $N$ -Teilchensystem  $6N$ -dimensional.

## • Energie-Zeit-Unschärfe und Energieerhaltungssatz

Dieser Punkt ist fast vollständig zitiert (Zitate in Anführungszeichen gesetzt) aus:  
Jörg Resag, *Kapitel 2 – Seltsame Quantenwelt – 5 Die Heisenbergsche Unschärfe*,  
[www.joergresag.privat.t-online.de/mybkhtml/chap35.htm](http://www.joergresag.privat.t-online.de/mybkhtml/chap35.htm)

„Was also ist mit der Zeitunschärfe  $\Delta t$  gemeint? ...

Eine gängige Sichtweise ist diese: *Um die Energie eines Systems mit der Genauigkeit  $\Delta E$  zu messen, benötigt man eine Messzeit von mindestens  $\Delta t$ .* Es gibt Beispiele, die diese Sichtweise unterstützen (z.B. die Ablenkung eines neutralen Teilchens mit Spin in einem Magnetfeld – das sogenannte Stern-Gerlach-Experiment), aber es gibt auch Gegenbeispiele (Bohm, Aharanov), so dass diese Sichtweise nicht konsistent überall durchgehalten werden kann.“

„Eine fruchtbare Sichtweise ergibt sich aus unserem obigen Bild eines Wellenpakets: Wir können die  $x$ -Achse entweder als Raumachse oder als Zeitachse interpretieren:

- Im ersten Fall betrachten wir die räumliche Erscheinung der Welle zu einem festen Zeitpunkt. Je kleiner das Wellenpaket räumlich ist, umso größer muss der Bereich der überlagerten Wellenlängen und damit der Impulse sein. Das ergibt dann die Impuls-Orts-Unschärfe.
- Im zweiten Fall betrachten wir die zeitliche Entwicklung der Welle an einem festen Ort. Je kürzer das Wellenpaket zeitlich dort ist, umso größer muss der Bereich der überlagerten Frequenzen und damit der Energien sein. Das ergibt dann die Energie-Zeit-Unschärfe.

Die Zeitunschärfe  $\Delta t$  ist also hier die zeitliche Dauer des Wellenpaketes, also die Zeitdauer, während der die Amplitude an einem bestimmten Raumpunkt schwingt. Das Wellenpaket besteht dabei aus einem Bereich konstruktiver Interferenz (große Amplitude), der von Bereichen destruktiver Interferenz (kleine Amplitude) begrenzt wird, ... .

Wie kann es zu einem zeitlich begrenzten Wellenpaket kommen? Dazu gibt es zwei Möglichkeiten:

1. Ein räumlich begrenztes Wellenpaket bewegt sich und durchläuft dabei einen bestimmten Ort. In diesem Fall ist  $\Delta t$  die **Durchlaufzeit**. Diese Sichtweise stammt von Niels Bohr.
2. Das Wellenpaket beschreibt die Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür, dass sich ein System vorübergehend in einem instabilen Zustand befindet. In diesem Fall ist  $\Delta t$  die **mittlere Lebensdauer** des instabilen Zustands.“

Einerseits ist also die Durchlaufzeit  $\Delta t$  das Zeitintervall, in dem sich ein Wellenpaket der Größe  $\Delta x$  mit der Geschwindigkeit  $v = \frac{dx}{dt}$  an einem festen Ort vorbeibewegt.

Andererseits ist also das Zeitintervall  $\Delta t$  des Wellenpaketes ungefähr die mittlere Lebensdauer eines angeregten Quantenzustands „und die Energieunschärfe  $\Delta E$  entspricht der **natürlichen Linienbreite** einer Spektrallinie oder der **Resonanzbreite** in einer Teilchenerzeugungsrate.“

„Der **Energieerhaltungssatz** wird durch die Energie-Zeit-Unschärfe dabei nicht verletzt, auch nicht für kurze Zeiten. Es wird auch keine Energie kurzzeitig *geborgt*. Statt dessen ist es einfach nur so, dass ein kurzlebiger Quantenzustand immer aus

einer Überlagerung mehrerer Energiewerte besteht, die alle als ununterscheidbare Möglichkeiten zum betrachteten Prozess beitragen können, je nach Randbedingung. Ein Atom kann von einem Grundzustand aus durch ein Photon in einen angeregten Energiezustand überführt werden und diesen durch Aussenden eines Photons gleicher Energie wieder verlassen. Aufgrund der Kurzlebigkeit des angeregten Energiezustandes ist dieser Prozess dabei für einen ganzen Photon-Energiebereich möglich, der der natürlichen Linienbreite der zugehörigen Spektrallinie entspricht.“

### 3 Schrödinger-Gleichung, Materiewellenfunktion

Viele quantenphysikalische Sachverhalte können durch die SGL beschrieben werden. Deshalb besteht die Anwendung der Quantenmechanik zu einem großen Teil in der Suche nach Lösungen der SGL.

Weil es sehr viel einfacher und für die Erläuterung grundlegender quantenmechanischer Prinzipien ausreichend ist, werden wir in diesem Kapitel nur Einteilchensysteme betrachten.

#### 3.1 Plausibilisierung der Schrödinger-Gleichung

Die SGL ist ein Postulat und lässt sich demzufolge nicht herleiten sondern nur plausibilisieren. Im Folgenden zeigen wir eine Plausibilisierung der SGL für den eindimensionalen Fall unter Verwendung der folgenden Größen und Beziehungen:

Wellenzahl	$k = \frac{2\pi}{\lambda},$
Kreisfrequenz	$\omega = 2\pi\nu = \frac{\hbar\omega}{\hbar} = \frac{E}{\hbar},$
Wellenausbreitungsgeschwindigkeit	$v = \frac{\lambda}{T} = \lambda\nu = \frac{\omega}{k},$
de Broglie-Beziehung	$p = \hbar k,$
Energie eines quantenmechanischen Objekts	$E = \frac{p^2}{2m}.$

Wir gehen aus von der klassischen Wellenfunktion. Eine ihrer reellen Formen ist beispielsweise

$$\Psi(x, t) = \Psi(x - vt) = A \cos \left[ \frac{2\pi}{\lambda} (x - vt) \right] = A \cos \left( \frac{2\pi}{\lambda} x - 2\pi\nu t \right) = A \cos(kx - \omega t).$$

Wie in der Physik praktischerweise üblich, werden wir im Folgenden aber die klassische Wellenfunktion in der komplexen Form

$$\Psi(x, t) = \Psi_0 \cdot e^{i \cdot (kx - \omega t)} = \Psi_0 \cdot e^{i \cdot \left( kx - \frac{E}{\hbar} t \right)} \quad (3.1)$$

verwenden. Durch zweimaliges Differenzieren einerseits nach der Zeit und andererseits nach dem Ort erhalten wir mit  $\omega = v \cdot k$  aus (3.1)

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(x, t) &= \Psi_0 i^2 (-\omega)^2 \cdot \Psi(x, t) = \Psi_0 i^2 v^2 k^2 \cdot \Psi(x, t), \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) &= \Psi_0 i^2 k^2 \cdot \Psi(x, t) \end{aligned}$$

und damit die **klassische Wellengleichung** in der allgemeinen Form

$$\boxed{\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(x, t) = v^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t)}. \quad (3.2)$$

Eine stehende Welle, auch stationäre Welle genannt, bei der sich nur die Amplitude mit der Zeit ändert, die also nicht mit der Zeit im Ortsraum fortschreitet, wird beschrieben beispielsweise durch die Funktion

$$\Psi(x, t) = \cos(\omega t) \cdot \tilde{\Psi}(x) \quad \text{bzw.} \quad \Psi(x, t) = \tilde{\Psi}(x) \cdot e^{\pm i\omega t}.$$

Setzen wir diese Wellenfunktion in die Wellengleichung (3.2) ein, so resultiert

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(x, t) &= \underbrace{i^2 \omega^2 e^{\pm i\omega t} \cdot \tilde{\Psi}(x)}_{=\Psi(x,t)} = v^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) = v^2 \cdot \underbrace{e^{\pm i\omega t} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \tilde{\Psi}(x)}_{=\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x,t)} \Rightarrow \\ -\omega^2 \cdot \Psi(x, t) &= v^2 \cdot \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) \quad \left| \quad \frac{\omega}{v} = \frac{2\pi\nu}{\lambda\nu} = k, \right. \end{aligned}$$

**Wellengleichung für stationäre Welle**  $\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) = -k^2 \cdot \Psi(x, t).$

Mit der de Broglie-Beziehung, d. h. mit  $k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2}$  wird daraus die Gleichung

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \cdot \Psi(x, t). \quad (3.3)$$

Die klassische Beziehung für die Gesamtenergie  $E$  eines Systems lautet mit der potentiellen Energie  $V$

$$E = E_{\text{kin}} + V = \frac{p^2}{2m} + V \quad \Leftrightarrow \quad p^2 = 2m(E - V).$$

Setzen wir dieses Ergebnis in die Gleichung (3.3) ein, so erhalten wir schließlich für den Fall, dass die potentielle Energie gemäß  $V = V(x)$  ortsabhängig ist, die zeitunabhängige bzw. stationäre SGL wie folgt:

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \cdot \Psi(x, t) \quad \Leftrightarrow$$

**stationäre SGL:**  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) + V(x) \cdot \Psi(x, t) = E \cdot \Psi(x, t)$

$\Psi(x, t)$  ist hierbei die **stationäre Wellenfunktion**.

Um die zeitabhängige SGL zu erhalten, bilden wir die erste Zeitableitung sowie die zweite Ortsableitung der komplexen allgemeinen Wellenfunktion (3.1) und verwenden  $k^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)$  mit  $V = V(x, t)$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) &= -i \frac{E}{\hbar} \cdot \Psi(x, t) \\ \Leftrightarrow E \cdot \Psi(x, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t), \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) &= i^2 k^2 \cdot \Psi(x, t) = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x, t)] \cdot \Psi(x, t) \\ \Leftrightarrow E \cdot \Psi(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \cdot \Psi(x, t). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Gleichsetzen von (3.5) und (3.4) liefert schließlich die

**zeitabhängige SGL:**  $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \cdot \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)$

### 3.2 Zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

- Von den drei QM-Ansätzen ist Schrödingers Wellenmechanik wohl am stärksten verwandt mit der klassischen Mechanik und vielleicht deshalb anwendungsfreundlich und in der Praxis geläufig. Die allgemeine Form der SGL ist die

#### zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$\boxed{-\underbrace{\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t)}_{\cong E_{\text{kin}}} + \underbrace{V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)}_{\cong E_{\text{pot}}} = i\hbar \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t)}_{\cong E_{\text{ges}}}} \quad (3.6)$$

$\nabla^2 = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ , Lösungsfunktion  $\Psi$ , potentielle Energie  $V$ , imaginäre Einheit  $i$ .

Die mathematischen „Operationsbefehle“, die auf der linken Seite auf  $\Psi$  wirken, werden vereinfachend zusammengefasst zum **Hamilton-Operator** (Hamiltonian)

$$\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t).$$

Die SGL ist ein **fundamentales Postulat** (Axiom) der QM, wurde von Erwin Schrödinger durch Analogiebetrachtungen gefolgert und ist somit nicht herleitbar. Sie betrifft die Energie quantenmechanischer Teilchensysteme, ist also eine Energiegleichung. Die potentielle Energie  $V$  wird in der Physik aus Bequemlichkeit meistens kurz und unkorrekt als Potential bezeichnet.

- Die SGL ist eine lineare Differentialgleichung. Deshalb gilt für ihre Lösungen  $\Psi$  das Superpositionsprinzip, d. h., auch alle Linearkombinationen

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_i c_i \Psi_i(\vec{r}, t), \quad c_i \in \mathbb{C}$$

sind Lösungen der SGL.

- Die zeitabhängige SGL ist eine lineare Differentialgleichung 1. Ordnung in der Zeit. Deshalb gilt: Wenn ihre Lösung für irgendeinen Zeitpunkt  $t_0$  bekannt ist, so ist sie auch für alle Zeiten  $t$  eindeutig bestimmt.
- Die SGL ist eine lineare Differentialgleichung 2. Ordnung im Ort.
- <sup>1</sup>Wenn wir als Lösungen  $\Psi$  nur entsprechend **normierte quadratintegrale Funktionen**  $\Psi(\vec{r}, t) \in L^2$  zulassen, also Funktionen die im Unendlichen hinreichend schnell verschwinden und bei Integration über den gesamten Ortsraum  $V$  die Bedingung

$$W = \int_V d^3r \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t) = \int_V d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \stackrel{!}{=} 1$$

<sup>1</sup>Dieser Aufzählungspunkt ist teilweise zitiert aus: Wolfgang Nolting, Springer-Lehrbuch, *Grundkurs Theoretische Physik 5/1, Quantenmechanik – Grundlagen*, 6. Auflage, Springer Berlin, Heidelberg, New York, 2004, Seite 95.

erfüllen, lassen sich die Lösungsfunktionen bzw. komplexwertigen **Materiewellenfunktionen**  $\Psi$  als **Wahrscheinlichkeitsamplituden** interpretieren. Die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Materiewellenfunktionen erfordert ihre Normierung. Es ist dann

$$\Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t) d^3r = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$$

die Wahrscheinlichkeit, das Quantenobjekt zur Zeit  $t$  im Volumenelement  $d^3r$  am Ort  $\vec{r}$  anzutreffen. Folglich ist das Betragsquadrat der Wahrscheinlichkeitsamplitude die **Wahrscheinlichkeitsdichte**.<sup>2</sup>

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \varrho(\vec{r}, t) .$$

Über die Bahn eines Teilchens können also nur („ungenau“) Wahrscheinlichkeitsaussagen gemacht werden. Die Wahrscheinlichkeit selbst, z. B. die ortsabhängige Wahrscheinlichkeit

$$W = \int_{\Delta V} d^3r \varrho(\vec{r}, t)$$

für den Raumbereich  $\Delta V$ , ist aber durch die Wahrscheinlichkeitsamplitude  $\Psi$  als Lösung der SGL **exakt** festgelegt.

- <sup>1</sup>Die (komplexen) Wahrscheinlichkeitsamplituden (Materiewellenfunktionen)  $\Psi$  besitzen keine physikalische Realität – im Gegensatz z. B. zu elektromagnetischen Wellen – und sind folglich nicht beobachtbar bzw. einer direkten Messung nicht zugänglich. Die eigentliche (beobachtbare) Messgröße ist die (reelle) Wahrscheinlichkeitsdichte  $|\Psi|^2$ .
- Das reelle Potential  $V(\vec{r}, t)$  in der SGL enthält **alle** Einflüsse durch äußere Kräfte bzw. Störungen (Wechselwirkungen) auf das quantenmechanische Teilchensystem. Das Potential charakterisiert deshalb wesentlich die quantenmechanischen Systeme und hat entscheidenden Einfluss auf die Form der Lösungen der SGL. Ist das Potential  $V$  zeitlich konstant, also nicht explizit zeitabhängig, müssen folglich auch die ganze linke Seite und somit auch die rechte Seite von (3.6) zeitlich konstant sein. Dieser Sachverhalt führt uns gleich zum nächsten Abschnitt.

### 3.3 Stationäre Schrödinger-Gleichung

Eine Plausibilisierung der „Zeitunabhängigkeit“ der stationären SGL findet man in: Josef Oswald, *Grundprinzipien der Quantenphysik, Vorlesung – WS03/04*, Abschnitt 2.4 *Stationäre Zustände*, Seite 58 bis Seite 62, [https://oswald.unileoben.ac.at/qpvl\\_1/qpvl.pdf](https://oswald.unileoben.ac.at/qpvl_1/qpvl.pdf)

- Die Lösung der zeitabhängigen SGL kann recht aufwendig sein, vereinfacht sich aber, wenn das **Potential nicht explizit zeitabhängig** ist, d. h. wenn

$$V = V(\vec{r}, t) \quad \longrightarrow \quad V = V(\vec{r}) .$$

<sup>2</sup>Anmerkung zur Maßeinheit von  $\Psi$  :

In der Ortsdarstellung muss die Wahrscheinlichkeitsdichte im 3-dimensionalen Ortsraum die Maßeinheit  $[\varrho(\vec{r}, t)] = \frac{1}{\text{m}^3}$  besitzen, im 1-dimensionalen Ortsraum aber  $[\varrho(x, t)] = \frac{1}{\text{m}}$ .

Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsamplitude hat dann die Maßeinheit  $[\Psi(\vec{r}, t)] = \frac{1}{\sqrt{\text{m}^3}} = \text{m}^{-\frac{3}{2}}$  bzw.  $[\Psi(\vec{x}, t)] = \frac{1}{\sqrt{\text{m}}} = \text{m}^{-\frac{1}{2}}$ . Dadurch ist gewährleistet, dass die aus der Integration über die Wahrscheinlichkeitsdichte resultierende Wahrscheinlichkeit dimensionslos ist.

Wir zeigen jetzt, dass in diesem Fall die zeitabhängige SGL übergeht in die zeitunabhängige bzw. stationäre SGL. Das heißt aber nicht, dass die Lösungen (Wahrscheinlichkeitsamplituden)  $\Psi$  von (3.6) dann keine Zeitabhängigkeit mehr beinhalten, denn schließlich sind die Lösungen Wellenfunktionen. „Stationär“ bedeutet in diesem Fall einerseits, dass sich die Form (speziell das Potential  $V$ ) der SGL mit der Zeit nicht ändert, und andererseits, dass das **Betragsquadrat**  $|\Psi|^2$  der Lösungsfunktionen  $\Psi$ , also die **Wahrscheinlichkeitsdichte**, zeitunabhängig, d. h. **stationär** ist.

- Suchen wir also eine allgemeine Lösung der SGL für das nicht explizit zeitabhängige Potential. Die zeitabhängige SGL (3.6) bekommt dann die Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t). \quad (3.7)$$

Machen wir einen Ansatz<sup>3</sup> für die Lösung dieser Differentialgleichung, indem wir annehmen, dass die Struktur der Lösungsfunktionen eine Separation ihres Zeiteanteils von ihrem Ortsanteil ermöglicht und dann die Lösungsfunktionen gebildet werden aus dem Produkt von Orts- und Zeiteanteil gemäß

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot f(t). \quad (3.8)$$

Wenn wir diesen **Produktansatz** in die SGL (3.7) einsetzen, können wir gespannt sein, was dann passiert:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) \cdot f(t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \cdot f(t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}) \cdot f(t) \\ f(t) \cdot \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) \right) + \psi(\vec{r}) \cdot f(t) \cdot V(\vec{r}) &= \psi(\vec{r}) \cdot \left( i\hbar \frac{d}{dt} f(t) \right), \end{aligned}$$

Division (Kürzen) durch  $\psi(\vec{r}) \cdot f(t)$ :

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} + V(\vec{r}) = \frac{i\hbar \frac{d}{dt} f(t)}{f(t)}.$$

Wir sehen, dass die linke Seite der letzten Gleichung nur von der Variablen  $\vec{r}$  abhängt und die rechte Seite nur von der Variablen  $t$ . Das aber bedeutet, dass diese Gleichung nur für eine (gemeinsame) Konstante erfüllt ist. Diese Konstante heißt **Separationskonstante**, weil es uns mit dem Produktansatz gelungen ist, die Abhängigkeit von mehreren Variablen in beiden Seiten der ursprünglichen Differentialgleichung aufzuteilen, sodass jede Seite nur noch von einer Variablen abhängt:  $A(\vec{r}) = \text{const} = B(t)$ . Dieses Verfahren erleichtert die Lösung der Differentialgleichung wesentlich.

Wir wollen die Separationskonstante hier  $E$  nennen, denn tatsächlich lässt sich  $E$  als die Gesamtenergie des quantenmechanischen Systems identifizieren, welches

---

<sup>3</sup>Bei diesem Ansatz handelt es sich um den üblichen multiplikativen Separationsansatz zur Lösung partieller Differentialgleichungen dieses Typs, d. h. für den Fall, dass das Potential  $V$  nicht explizit zeitabhängig ist.

jetzt durch zwei voneinander unabhängige (nicht gekoppelte) Differentialgleichungen beschrieben wird:

$$\begin{aligned} \frac{i\hbar \frac{d}{dt} f(t)}{f(t)} = E &\iff i\hbar \frac{d}{dt} f(t) = E \cdot f(t), & (3.9) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) = E &\iff -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r}). \end{aligned}$$

Weil einerseits der Operator  $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$  nur auf den Ortsanteil  $\psi(\vec{r})$  von  $\Psi(\vec{r}, t)$  wirkt und andererseits der Operator  $i\hbar \frac{d}{dt}$  nur auf den Zeitanteil  $f(t)$ , resultiert aus unserem Produktansatz  $\psi(\vec{r}) \cdot f(t) = \Psi(\vec{r}, t)$  die

### zeitunabhängige oder stationäre SGL

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \cdot \Psi(\vec{r}, t) = E \cdot \Psi(\vec{r}, t)}. \quad (3.10)$$

Die kompakte Schreibweise für die stationäre SGL ist  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ .

- Jetzt lösen wir die zeitabhängige Differentialgleichung (3.9), eine homogene lineare Differentialgleichung erster Ordnung, also  $f' + kf = 0$ :

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} = -i\frac{E}{\hbar} \cdot f &\Rightarrow \int \frac{1}{f} df = -i\frac{E}{\hbar} \int dt \\ \ln f = -i\frac{E}{\hbar} \cdot t + c &\Rightarrow f = f(t) = \tilde{c} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Die Konstante  $\tilde{c} = e^c$  (mit der Integrationskonstanten  $c$ ) soll in die Normierungskonstante von  $\Psi(\vec{r}, t)$  eingehen, sodass mit  $E/\hbar = \omega$

$$\boxed{f(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = e^{-i\omega t}} \quad (3.12)$$

resultiert. Setzen wir die beiden Teillösungen  $\psi(\vec{r})$  und (3.12) wieder zusammen, erhalten wir die separierte Lösungsfunktion, d. h. die **allgemeine Lösung der stationären SGL**:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}. \quad (3.13)$$

Die Normierungskonstante sei Bestandteil der allein ortsabhängigen Teillösung  $\psi(\vec{r})$ .

- Einsetzen von (3.13) in die SGL (3.7) mit  $V = V(\vec{r})$  liefert

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ &= i\hbar \left( -i\frac{E}{\hbar} \right) \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ &= E \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \end{aligned}$$

mit der konstanten Gesamtenergie  $E$  des Systems.

- Wie man sieht, sind die separierten Lösungen (3.13), also  $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ , zeitabhängig. Diese Zeitabhängigkeit resultiert nur aus dem **Phasenfaktor**  $e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ , der mit der Kreisfrequenz  $\frac{E}{\hbar} = \omega$  oszilliert. Weil dieser Phasenfaktor aber bei der Bildung des Betragsquadrates der Lösungsfunktionen herausfällt, erhalten wir zeitunabhängige Wahrscheinlichkeitsdichten

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^*(\vec{r}) e^{+i\frac{E}{\hbar}t} \cdot \psi(\vec{r}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = |\psi(\vec{r})|^2$$

und sprechen von der stationären SGL mit stationären Quantenzuständen als Lösungen. Denn messbar sind nicht die oszillierenden (komplexen) Wahrscheinlichkeitsamplituden sondern nur die (reellen) Wahrscheinlichkeitsdichten.

- **Achtung!**

Jede Linearkombination von separierten Lösungen (für stationäres Potential  $V(\vec{r})$ )

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n \Psi_n(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

ist wieder eine Lösung, die aber **im Allgemeinen nicht stationär** ist.

- **Zusammenfassung** der Konsequenzen aus der expliziten Zeitunabhängigkeit des Potentials in der SGL, also aus  $V = V(\vec{r}, t) \longrightarrow V = V(\vec{r})$

1. Für die zeitabhängige SGL resultieren separierte Lösungen  $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ .
2. Diese separierten Lösungen selbst sind zeitabhängig, ihr Betragsquadrat jedoch ist stationär:  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$ .
3. Durch den multiplikativen Separationsansatz resultiert aus der zeitabhängigen SGL die

$$\text{stationäre SGL} \quad \hat{H}\Psi = E\Psi$$

mit dem zeitunabhängigen Hamilton-Operator (Hamiltonian)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \text{ und der konstanten Systemgesamtenergie } E.$$

4. Wegen  $E = \text{const}$  ist der **Erwartungswert**  $\langle E \rangle$ , d. h. der quantenmechanische Mittelwert von  $E$

$$\langle E \rangle = \int d^3r \Psi^* E \Psi = E \underbrace{\int d^3r \Psi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})}_{= 1 \text{ nach Voraussetzung}} = E.$$

5. Weil die Gesamtenergie des Teilchens (zeitunabhängig) konstant ist, kann das explizit zeitunabhängige Potential  $V(\vec{r})$  nur **konservative** (energieerhaltende) auf das Teilchen wirkende **Kräfte** zur Folge haben. Systeme, die durch die stationäre SGL beschrieben werden, sind demzufolge konservativ.

## 4 Das freie quantenmechanische Teilchen

Zur Vereinfachung werden wir in diesem Kapitel wieder nur das quantenmechanische Einteilchensystem betrachten. Außerdem werden wir uns im Ortsraum und folglich auch im Impulsraum auf eine Dimension beschränken und nur die  $x$ -Achse und die  $p_x$ -Achse benutzen, wobei wir  $p_x = p$  setzen. Die auf diese Weise erhaltenen Ergebnisse, lassen sich ohne große Mühe auf den dreidimensionalen Ortsraum bzw. den dreidimensionalen Impulsraum verallgemeinern.

$\Phi(k, t)$  ist die Fourier-Transformierte von  $\Psi(x, t)$ , also das kontinuierliche **Amplitudenspektrum** bzw. die **Amplitudenfunktion** von  $\Psi(x, t)$  im  $k$ -Raum. Man beachte hierbei die Abhängigkeit von  $t$ , die von der Transformation unberührt bleibt.

**Die Fourier-Transformierte einer Gauß-Funktion ist ebenfalls eine Gauß-Funktion.** Wegen der sich daraus ergebenden guten Vergleichbarkeit werden wir unseren Betrachtungen von Wellenpaketen als Teilchenmodell ausschließlich Gauß-Verteilungen zugrundelegen.

Weiterhin werden wir in diesem Kapitel die mittleren quadratischen Abweichungen<sup>1</sup> bzw. **Schwankungen**  $\Delta x$  von  $x$  und  $\Delta k$  von  $k$  benötigen:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad \Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2}.$$

Darin sind  $\langle x \rangle$  und  $\langle k \rangle$  die Erwartungswerte bzw. die quantenmechanischen Mittelwerte gemäß

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x)|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad \langle x \rangle = \langle \Psi | \hat{x} | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* x \Psi,$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} dk |A(k)|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad \langle k \rangle = \langle A | \hat{k} | A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk A^* k A.$$

Auf die **Dirac-Notation** bzw. Bra-Ket-Notation mit

den Hilbert-Raum-Vektoren bzw. Ket-Ausdrücken  $|\dots\rangle$ ,

den zugehörigen Dualraum-Vektoren bzw. Bra-Ausdrücken  $\langle \dots |$  und

den quantenmechanischen Operatoren bzw. Observablen (hier der Ortsoperator  $\hat{x}$ ) wollen wir aber nicht weiter eingehen. Es reicht in diesem Zusammenhang, wenn wir wissen, dass es diese verallgemeinerte, koordinatenunabhängige Darstellungsform gibt.

---

<sup>1</sup>Praxisnahe Plausibilisierungen des Begriffs der mittleren quadratischen Abweichung findet man im Kapitel 10 *Gesetz der großen Zahlen – Binomialverteilung* meines Skriptes *Grundlegendes zur Statistischen Physik*

sowie im Springer-Lehrbuch von Wolfgang Demtröder *Experimentalphysik 1 – Mechanik und Wärme*, 3. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2003, Seite 29 bis Seite 33, Abschnitt 1.8 *Messgenauigkeit und Messfehler*.

## 4.1 Wellenfunktion des freien Teilchens

Wenn das Potential in der zeitabhängigen SGL (3.6) (zeitlich konstant) identisch Null, also

$$V(x) \equiv 0$$

ist, dann bewegt sich ein durch diese SGL beschriebenes Teilchen ungestört bzw. kräftefrei im Raum, d. h., es handelt sich in diesem Fall um ein freies Teilchen. Und weil das Potential zeitlich konstant (identisch Null) ist, wird zur Lösung der SGL wieder der Produktansatz benutzt. Dann haben wir aber bereits mit (3.12) die zeitabhängige Teillösung  $f(t) = e^{-i\omega t}$  berechnet. Wir brauchen also nur noch die stationäre SGL für  $V \equiv 0$  zu lösen, um die allein ortsabhängige Teillösung zu erhalten:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) &= E \cdot \Psi(x, t), \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \cdot e^{-i\omega t} &= E \cdot \psi(x) \cdot e^{-i\omega t}, \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) &= E \cdot \psi(x). \end{aligned} \quad (4.1)$$

(4.1) ist eine homogene lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung der Form

$$\psi'' + a\psi = 0, \quad a = \frac{2m}{\hbar^2} E \stackrel{(2.2)}{=} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = k^2,$$

die wir routinemäßig mit dem Exponentialansatz  $\psi(x) = e^{\mu \cdot x}$  lösen. Wir erhalten  $\mu = \pm\sqrt{-a}$  und damit die allgemeine Lösung

$$\psi(x) = A_1 e^{+ik \cdot x} + A_2 e^{-ik \cdot x}. \quad (4.2)$$

Die Lösung  $\Psi(x, t)$  der (stationären) SGL für ein freies Teilchen ist also das Produkt aus der allein ortsabhängigen Teillösung (4.2) und der allein zeitabhängigen Teillösung (3.11) und hat die Form einer ebenen Welle:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = \psi(x) \cdot f(t) &= (C_1 e^{+ik \cdot x} + C_2 e^{-ik \cdot x}) \cdot e^{-i\omega t} \Rightarrow \\ \Psi(x, t) &= C_1 e^{i(kx - \omega t)} + C_2 e^{-i(kx + \omega t)}. \end{aligned}$$

Dabei ist die Konstante  $\tilde{c}$  der zeitabhängigen Teillösung in die Konstanten  $C_1$  und  $C_2$  eingegangen.

Ausgehend von einem Fixpunkt  $x_0$  kann man sich überlegen, dass  $C_1 e^{\pm i(kx - \omega t)}$  ebene Wellen beschreibt, die sich in die positive Richtung der  $x$ -Achse ausbreiten.  $C_2 e^{\pm i(kx + \omega t)}$  dagegen beschreibt ebene Wellen, die sich in die negative Richtung der  $x$ -Achse ausbreiten. Die Konstanten  $C_1$  und  $C_2$  werden durch die Rand- oder/und Anfangsbedingungen festgelegt.

Das von uns beobachtete quantenmechanische Teilchen soll sich in die positive Richtung längs der  $x$ -Achse bewegen. Deshalb muss die Konstante  $C_2$  verschwinden. Wir

wählen folglich für unser freies Teilchen die Materiewellenfunktion (Wahrscheinlichkeitsamplitude)

$$\Psi(x, t) = C e^{i(kx - \omega t)} .$$

Diese Lösung setzen wir in die (allgemeine) zeitabhängige SGL (3.6) ein und berücksichtigen  $V \equiv 0$ :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) , \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} C e^{i(kx - \omega t)} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C e^{i(kx - \omega t)} , \\ \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} &= \hbar\omega \\ \Leftrightarrow \frac{\hbar k^2}{2m} &= \omega(k) . \end{aligned} \tag{4.3}$$

Mit (4.3) haben wir die **Dispersionsrelation** für ebene Materiewellen gefunden. Diese Dispersionsrelation besagt, dass ebene Materiewellen bei frei wählbarer Wellenzahl  $k$  nur dann die SGL lösen, wenn sie die Gleichung (4.3) erfüllen. Es ist also bei Materiewellen immer zu berücksichtigen, dass ihre Kreisfrequenz  $\omega = 2\pi \cdot \nu$  (bzw. ihre Frequenz  $\nu$ ) abhängig ist von der Wellenzahl  $k = 2\pi/\lambda$  (bzw. ihrer Wellenlänge  $\lambda$  oder ihrem Impuls  $p = \hbar k$ ).

Überlagern sich mehrere Teilchenwellen bzw. Materiewellen mit verschiedenem Impuls  $\hbar k$ , gebildet von einem<sup>2</sup> Teilchen der Ruhemasse  $m$ , zu einer „Wellengruppe“, dann gilt für die Phasengeschwindigkeit<sup>3</sup>  $v_p$  jeder einzelnen Welle

$$v_p = \lambda \cdot \nu = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

und für die Gruppengeschwindigkeit  $v_g$  der Wellengruppe

$$v_g = \frac{d\omega(k)}{dk} = \frac{\hbar k}{m} .$$

Wie man sieht, ist bei Materiewellen die Gruppengeschwindigkeit größer als die Phasengeschwindigkeit. Die Gruppengeschwindigkeit kann als die eigentliche Teilchengeschwindigkeit angesehen werden. Materiewellen mit größerem Impuls haben nicht nur eine höhere Frequenz, sondern besitzen auch eine größere Phasengeschwindigkeit als Materiewellen mit kleinerem Impuls.

Im Gegensatz dazu besitzen ruhemasselose Teilchen, also Photonen, die Dispersionsrelation  $\omega = \omega(k) = c \cdot k$ , sodass die Gruppengeschwindigkeit eines nichtmonochromatischen Lichtstrahls gleich der Phasengeschwindigkeit jeder seiner Teilwellen verschiedener Frequenz ist, nämlich gleich der Lichtgeschwindigkeit:

$$v_g = \frac{d}{dk} c k = v_p = \frac{c k}{k} = c = \text{const} .$$

<sup>2</sup>Wegen der Heisenberg'schen Unschärferelation ist dieser Ansatz nicht widersprüchlich.

<sup>3</sup>Für die Phase einer Wellenfront gilt:

$$\begin{aligned} \varphi = \vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t = \text{const} \text{ und } \vec{k} \cdot \vec{r} &= |\vec{k}| \cdot |\vec{r}| \cos \angle(\vec{k}, \vec{r}) = k \cdot r_k \Rightarrow k \cdot r_k - \omega t = \text{const} \Leftrightarrow \\ r_k = \frac{\text{const}}{k} + \frac{\omega t}{k} &\Rightarrow v_p = \frac{dr_k}{dt} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{1}{2} v_g . \end{aligned}$$

Die Materiewellenfunktion (Wahrscheinlichkeitsamplitude) eines freien Teilchens, das sich in die positive Richtung der  $x$ -Achse bewegt, hat somit die endgültige Form

$$\boxed{\Psi(x, t) = C e^{i[kx - \omega(k)t]}}. \quad (4.4)$$

### Achtung!

Die Funktion der ebenen Welle ist nicht quadratintegabel und folglich nicht normierbar:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \cdot \Psi = \int_{-\infty}^{\infty} dx C^* e^{-i(kx - \omega t)} \cdot C e^{i(kx - \omega t)} = |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = |C|^2 x \Big|_{-\infty}^{\infty} \rightarrow \infty.$$

Die freie Materiewelle ist in diesem Fall über die gesamte  $x$ -Achse (allgemein über den gesamten Ortsraum) delokalisiert. Mit anderen Worten, das freie Teilchen wird hier durch *eine* ebene Welle beschrieben, die (orts)räumlich und zeitlich unendlich ausgedehnt ist.

Tatsächlich ist aber eine ebene Welle mit unendlicher Ausdehnung nicht real. In der Realität haben wir es mit begrenzten Räumen zu tun. Das einfachste derartige Standardmodell ist ein quantenmechanisches Teilchen im eindimensionalen Potentialtopf mit unendlich hohen „Potentialwänden“, wobei innerhalb des Topfs  $V \equiv 0$  gelten soll (s. Kapitel 5). In diesem Fall ist das Teilchen nicht mehr frei, sondern im Topf gefangen oder besser gesagt, **gebunden**, weshalb die ebene Wellenfunktion am Rand (an der Potentialtopfwand) verschwindet. Auf diese Weise wird die Wellenfunktion normierbar. Für einen Topf der Breite  $\Delta x = L$  lautet dann die Normierung

$$C = \frac{1}{\sqrt{L}} \Rightarrow \int_0^L dx \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-i(kx - \omega t)} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i(kx - \omega t)} = \frac{1}{L} \int_0^L dx = \frac{1}{L} x \Big|_0^L = 1.$$

Die (Gesamt-)Energie  $E$  **freier** Teilchen ist gleich ihrer kinetischen Energie  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  und das Spektrum der diesen freien Teilchen prinzipiell zugänglichen Energiewerte, welche sich aus der SGL ergeben, ist **kontinuierlich**.

Bei gebundenen Teilchen ist dies anders. Die räumliche Begrenzung des Teilchenaufenthaltsbereichs bewirkt, dass die SGL nur bestimmte Gesamtenergiewerte der Teilchen zulässt. Das Spektrum der Gesamtenergie  $E$  **gebundener** Teilchen ist **diskret** – ein wesentliches, rein-quantenphysikalisches Phänomen. Zum „Teilchen im Potentialtopf“ mit unendlichem und mit endlichem Potential findet man viele, gut illustrierte Beispiele im Internet.

Wie manifestiert sich die Heisenberg'sche Unschärferelation an einem freien Teilchen? Die Delokalisierung der Wellenfunktion eines freien Teilchens über den gesamten Ortsraum bedeutet, dass die räumliche Unschärfe des Teilchens gegen unendlich geht, d. h.  $\Delta x \rightarrow \infty$ . Demzufolge muss die Impulsunschärfe des freien Teilchens gegen Null gehen, also  $\Delta p \rightarrow 0$ , d. h., der Impuls des freien Teilchens muss scharf sein. Diesen Zusammenhang kann man für ein Teilchen mit dem (scharfen) Impuls  $\hbar k_0$  durch Fourier-Transformation der freien Wellenfunktion (der Funktion der ebenen Welle)

vom Ortsraum in den  $k$ -Raum<sup>4</sup> darstellen:<sup>5</sup>

$$\begin{aligned}
 \Psi(x, t) = C e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} &\xrightarrow{\mathcal{F}} \Phi(k, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, t) e^{-ikx} \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \underbrace{C e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]}}_{\Psi(x, t)} e^{-ikx} \\
 &= C e^{-i\omega(k_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(k-k_0)x} \\
 \Phi(k, t) &= C e^{-i\omega(k_0)t} \cdot 2\pi \delta(k - k_0) . \quad (4.5)
 \end{aligned}$$

Die Dirac'sche  $\delta$ -Distribution

$$\delta(k - k_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(k-k_0)x} ,$$

üblicherweise  $\delta$ -Funktion genannt, beschreibt sinngemäß einen unendlich schmalen und dafür aber unendlich hohen Peak an der (konstanten) Stelle  $k_0$  auf der  $k$ -Achse. Sie ist definiert durch das Integral

$$\int_{k_1}^{k_2} dk \delta(k - k_0) = \begin{cases} 0 , & k_0 \notin [k_1, k_2] \\ 1 , & k_0 \in [k_1, k_2] \end{cases} .$$

Wir sehen, dass die „Wellenfunktion“ des Teilchens im  $k$ -Raum tatsächlich (scharf) an der Stelle  $k_0 \hat{=} p_0$  lokalisiert ist.

Der Vollständigkeit halber zeigen wir noch die Fourier-Rücktransformation von (4.5):

$$\begin{aligned}
 \Psi(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \Phi(k, t) e^{ikx} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk C e^{-i\omega(k_0)t} \cdot 2\pi \delta(k - k_0) e^{ikx} \\
 \Psi(x, t) &= C e^{i[k_0 x - \omega(k_0)t]} .
 \end{aligned}$$

<sup>4</sup>Wegen der De Broglie-Beziehung  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  entspricht der Impuls  $p$  der Wellenzahl  $k$  und der  $k$ -Raum steht für den Impulsraum.

<sup>5</sup>Die Fourier-Transformierte der Funktion einer ebenen Welle ist eine  $\delta$ -Funktion.

## 4.2 Materiewellenpaket und Teilchenunschärfe

Wir wollen jetzt durch Superposition (Überlagerung) verschiedener ebener Materiewellen ein (begrenzt)es Wellenpaket als Modell für ein reales Teilchen konstruieren. Dabei gehen wir aus von (4.4), der Lösung der stationären SGL für das freie Teilchen:

$$\Psi(x, t) = C e^{ikx} \cdot e^{-i\omega(k)t} = C e^{i[kx - \omega(k)t]} .$$

Weil die SGL eine lineare Differentialgleichung ist, sind auch die Superpositionen

$$\sum_n C_n e^{i[k_n x - \omega(k_n)t]} = \Psi(x, t) \quad (4.6)$$

Lösungen, wobei die  $C_n$  ein diskretes Amplitudenspektrum bilden. Verwenden wir aber statt des diskreten Amplitudenspektrums die Amplitudenfunktion  $\tilde{A}(k)$ , geht (4.6) über in das Integral

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{A}(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} . \quad (4.7)$$

Dabei ist  $\tilde{A}(k)$  so zu wählen, dass die auf diese Weise konstruierte Lösung  $\Psi(x, t)$  normierbar ist. Vergleichen wir die Fourier-Rücktransformation (1.3)

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \Phi(k, t) e^{ikx}$$

mit der Lösung (4.7), so stellen wir fest, dass die Fourier-Transformierte von  $\Psi(x, t)$ , nämlich die Wellenfunktion  $\Phi(k, t)$  die Form

$$\Phi(k, t) = \tilde{A}(k) e^{-i\omega(k)t} .$$

hat. Wie wir sehen, lassen sich bei geeigneter Wahl der Amplitudenfunktion  $\tilde{A}(k)$  mit Hilfe der Fourier-Transformation aperiodische Funktionen wie z. B. ein (begrenzt)es Wellenpaket darstellen. So ein Wellenpaket ist dann im Prinzip nichts anderes als eine Superposition von unendlich vielen verschiedenen ebenen Wellen.

Zum Zeitpunkt  $t = 0$  gilt für den zeitabhängigen Phasenfaktor  $e^{-i\omega(k)t} = e^{-0} = 1$  und folglich

$$\Phi(k, 0) = \tilde{A}(k) \quad \Rightarrow \quad \Psi(x, 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{A}(k) e^{ikx} .$$

Nehmen wir jetzt an, die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des (unscharfen!) Teilchens bzw. des Materiewellenpakets *entspreche* im Ortsraum nicht *einer* ebenen Materiewelle sondern sei zum Zeitpunkt  $t = 0$  die **Gauß'sche Normalverteilung**

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} = |\Psi(x, 0)|^2 = \varrho(x) .$$

Weil bei  $t = 0$  der zeitabhängige Phasenfaktor  $e^{-i\omega(k)t}$  gleich eins ist, vereinfacht sich die zugehörige Wahrscheinlichkeitsamplitude<sup>6</sup> zu

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}}$$

mit der Normierung

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, 0)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} = 1 .$$

Hierbei haben wir das **Gauß-Integral**

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ay^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (4.8)$$

mit den Substitutionen

$$\frac{1}{2\sigma^2} = a, \quad x - x_0 = y, \quad dx = dy$$

verwendet und erhalten

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-ay^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot \sqrt{2\pi\sigma^2} = 1 . \quad \square$$

Berechnen wir jetzt die Fourier-Transformierte bzw. das kontinuierliche Amplitudenspektrum  $\Phi(k, 0) = \tilde{A}(k)$  von  $\Psi(x, 0)$  gemäß (1.2):

$$\begin{aligned} \tilde{A}(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, 0) e^{-ikx} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} \cdot e^{-ikx} \\ \tilde{A}(k) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\left[\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + ikx\right]}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$\tilde{A}(k) = (8\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}} e^{-\sigma^2 k^2} \cdot e^{-ikx_0} . \quad (4.10)$$

<sup>6</sup>Im Physik-Skript *Quantenphysik und statistische Physik* von Peter Ryder, Shaker Verlag, Aachen, 2004, findet man auf Seite 20 die folgenden Fourier-Transformationen zum Zeitpunkt  $t = 0$  :

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) \cdot e^{ikx} dk \quad \longleftrightarrow \quad F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\sigma\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \cdot e^{-x^2/(2\sigma^2)} \cdot e^{-i(k-k_0)x} dx \\ &\Rightarrow \quad \psi(x) = (\sigma\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \cdot e^{-x^2/(2\sigma^2)} \cdot e^{ik_0x} . \end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeitsfunktion  $\psi(x)$  wird dabei konstruiert durch die Modulation der ebenen Welle  $e^{ik_0x}$  mit einer Gauß-Funktion und charakterisiert ein Teilchen mit dem Impuls  $p_0 = \hbar k_0$ .

Den Lösungsweg für dieses Integral zeigen wir im Anhang. Die Fourier-Transformierte (4.10) entspricht einer Gauß-Kurve, ist aber nicht normiert:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dk |\tilde{A}(k)|^2 = \sqrt{8\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-2\sigma^2 k^2} = \sqrt{8\pi\sigma^2} \sqrt{\frac{\pi}{2\sigma^2}} = 2\pi .$$

Dieses Ergebnis wird bestätigt durch das **Parseval'sche Theorem** (1.5)

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, 0)|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk |\tilde{A}(k)|^2 = \frac{2\pi}{2\pi} = 1 .$$

Um  $\tilde{A}(k)$  zu normieren, brauchen wir (4.10) nur mit  $1/\sqrt{2\pi}$  zu multiplizieren und erhalten schließlich

$$A(k) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\sigma^2 k^2} \cdot e^{-ikx_0} .$$

Mit

$$\left(\frac{2\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} = K$$

resultiert schließlich

$$A(k) = K \cdot e^{-\sigma^2 k^2} \cdot e^{-ikx_0} .$$

Die zugehörige (normierte) Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist dann

$$|A(k)|^2 = K^2 \cdot e^{-2\sigma^2 \cdot k^2} . \quad (4.11)$$

(4.11) mit  $k_0 = 0$  ist die spezielle Form der entsprechenden verallgemeinerten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$|A(k)|^2 = K^2 \cdot e^{-2\sigma^2(k-k_0)^2} . \quad (4.12)$$

Diese Gauß-Kurven besitzen ihr Maximum an der Stelle der mittleren Wellenzahl  $k_0$ . Gauß-Kurven fallen zu beiden Seiten ihres Maximums symmetrisch ab.

Um die Heisenberg'sche Unschärfe des Wellenpakets zum Zeitpunkt  $t = 0$  zu beurteilen, benötigen wir die Erwartungswerte von  $x$ ,  $x^2$ ,  $k$ ,  $k^2$ , woraus wir dann die Schwankungen (Unschärfen)  $\Delta x$  von  $x$  und  $\Delta k$  von  $k$  berechnen können, wobei wir die uneigentlichen Integrale

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy y \cdot e^{-ay^2} = 0 \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 \cdot e^{-ay^2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

verwenden. Die vollständigen Lösungswege für (4.13) und (4.14) sind im Anhang zu

finden:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x \cdot |\Psi(x, 0)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} = x_0, \quad (4.13)$$

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x^2 \cdot |\Psi(x, 0)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} = x_0^2 + \sigma^2, \quad (4.14)$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{x_0^2 + \sigma^2 - x_0^2} = \sigma.$$

$$\langle k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dk \cdot k \cdot |A(k)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dk \cdot k \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} e^{-2\sigma^2 k^2} = 0,$$

$$\begin{aligned} \langle k^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dk \cdot k^2 \cdot |A(k)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dk \cdot k^2 \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} e^{-2\sigma^2 k^2} \\ &= \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} \cdot \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{(2\sigma^2)^3}} = \sqrt{\frac{2\pi\sigma^2}{4\pi \cdot 8\sigma^6}} = \frac{1}{4\sigma^2}, \end{aligned}$$

$$\Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2} = \sqrt{\langle k^2 \rangle} = \frac{1}{2\sigma}.$$

Wie wir sehen, ist die Schwankung bzw. Unschärfe  $\Delta x = \sigma$  die in der Statistik verwendete mittlere quadratische Abweichung in der Gauß'schen Normalverteilung. Die Größe  $2\sigma$  wird deshalb oft als Maß für die Breite der Gauß'schen Glockenkurve angenommen. Weiterhin stellen wir fest, dass sich die Unschärfen  $\Delta x$  und  $\Delta k$  eines Wellenpakets umgekehrt proportional zueinander verhalten:

$$\Delta x \propto \frac{1}{\Delta k}.$$

Wenn also z. B. die Verteilung  $|\Psi(x, 0)|^2$  (im Ortsraum) breiter wird, dann muss die Verteilung  $|A(k)|^2$  (im  $k$ -Raum) im gleichen Verhältnis schmaler werden. Das Produkt aus den Breiten der beiden Verteilungen, die Heisenberg'sche **Orts-Impuls-Unschärfe**, ist dabei aber konstant und **minimal**:

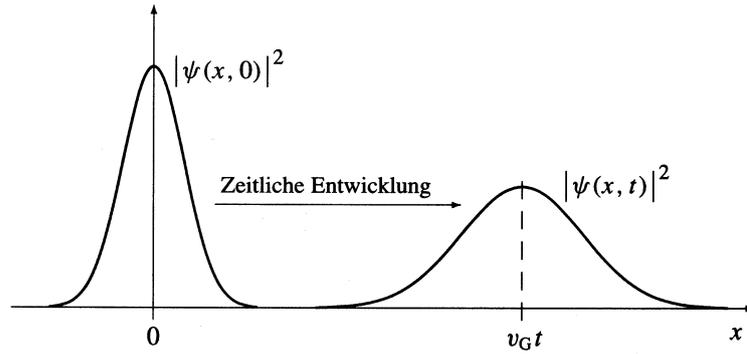
$$\Delta x \cdot \Delta p = \Delta x \cdot \hbar \Delta k = \sigma \cdot \frac{\hbar}{2\sigma} = \frac{\hbar}{2}.$$

Minimal ist diese Orts-Impuls-Unschärfe aber nur bei  $t = 0$ , wie sich im nächsten Abschnitt herausstellen wird.

### 4.3 Breitfließen (Dispersion) des Gauß'schen Wellenpakets

#### Achtung!

Wenn im Folgenden die Integrationsgrenzen nicht angegeben werden, soll die Integration von  $-\infty$  bis  $+\infty$  erfolgen. Dabei handelt es sich um eine in der Physik sehr oft praktizierte Vereinfachung.



**Abb. 4.1** Abbildung aus: Torsten Fließbach, *Quantenmechanik – Lehrbuch zur Theoretischen Physik III*, 4. Auflage, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2005, Seite 66. Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eines Gauß'schen Wellenpakets zum Anfangszeitpunkt  $t = 0$  und zur Zeit  $t > 0$  unter der Anfangsbedingung  $x_0 = 0$ .

Im Abschnitt zuvor hatten wir ein Gauß'sches Wellenpaket zum Anfangszeitpunkt  $t = 0$  kennengelernt. Jetzt wollen wir die zeitliche Entwicklung dieses Wellenpakets betrachten, also für  $t > 0$ . Dabei soll sich das Maximum des Wellenpakets mit der Gruppengeschwindigkeit  $v_g$  in die positive Richtung der Ortskoordinate  $x$  bewegen. Das aber bedeutet, dass in unseren Überlegungen sowohl die allein zeitabhängige Teillösung (der zeitabhängige Phasenfaktor)  $e^{-i\omega t}$  als auch die Abhängigkeit der Kreisfrequenz von der Wellenzahl (bzw. vom Impuls), also die **Dispersionsrelation**

$$\omega(k) = \frac{E(k)}{\hbar} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

zu berücksichtigen sind. Wir werden am Ende feststellen können, dass das Wellenpaket mit der Zeit auseinanderläuft, weil sich innerhalb des Wellenpakets die Teilwellen mit größerem Impuls  $\hbar k$  schneller fortbewegen als die Teilwellen mit kleinerem Impuls. Damit geht aber auch eine Zunahme der Heisenberg'schen Unschärfe des Teilchens (des Wellenpakets) einher.

In Übereinstimmung mit der Fourier-Rücktransformation (1.3) und dem Lösungintegral (4.7) schreiben wir allgemein für unser Wellenpaket, also unter Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \Phi(k, t) \cdot e^{ikx} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \tilde{A}(k) e^{-i\omega(k)t} \cdot e^{ikx} . \end{aligned}$$

An Stelle von  $\tilde{A}(k)$  verwenden wir jetzt aber nicht die unnormierte Form (4.10) sondern gehen aus von der **normierten** Wahrscheinlichkeitsdichte (4.12)

$$|A(k)|^2 = K^2 \cdot e^{-2\sigma^2(k-k_0)^2} = \frac{\sqrt{2\sigma^2}}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-2\sigma^2(k-k_0)^2} ,$$

verwenden also die Gauß-Funktion

$$A(k) = K \cdot e^{-\sigma^2(k-k_0)^2} .$$

Es resultiert die nicht normierte Funktion

$$\tilde{\Psi}(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk K e^{-\sigma^2(k-k_0)^2} \cdot e^{-\omega(k)t} \cdot e^{ikx} . \quad (4.15)$$

$k_0$  ist die Stelle des Peaks der Gauß-Kurve und entspricht dem wahrscheinlichsten Impuls, d. h., die Wahrscheinlichkeit des Auftretens größerer oder kleinerer Impulse fällt zu beiden Seiten des Peaks stetig ab. Deshalb entwickeln wir die Dispersionsrelation an der Stelle  $k_0$  in eine Taylor-Reihe:

$$\begin{aligned} \omega(k) &= \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \dots \\ &= \frac{\hbar k_0^2}{2m} + \underbrace{\frac{\hbar k_0}{m}}_{v_g} (k - k_0) + \underbrace{\frac{\hbar}{2m}}_{\beta} (k - k_0)^2 \\ \omega(k) &= \omega_0 + v_g (k - k_0) + \beta (k - k_0)^2 . \end{aligned} \quad (4.16)$$

Die Entwicklung bricht nach der zweiten Ordnung ab, weil bereits die dritte Ableitung von  $\frac{\hbar k^2}{2m}$  nach  $k$  verschwindet.  $v_g$  ist die Gruppen- bzw. Teilchengeschwindigkeit, also die Geschwindigkeit des Peaks im Ortsraum, und  $\beta$  ist der Dispersionsparameter. Beide sind hier konstant. Statt der Taylor-Entwicklung hätten wir einen formalen, dafür aber einfacheren Weg gehen können – wir finden ihn im Anhang. Setzen wir also die Entwicklung (4.16) in die Gleichung (4.15) ein:

$$\tilde{\Psi}(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk K e^{-\sigma^2(k-k_0)^2} \cdot e^{ikx} \cdot e^{-i[\omega_0 + v_g(k-k_0) + \beta(k-k_0)^2]t} ,$$

$$\boxed{\tilde{\Psi}(x, t) = \frac{K}{2\pi} \int dk e^{-\sigma^2(k-k_0)^2} \cdot e^{ikx} \cdot e^{-i[\omega_0 + v_g(k-k_0) + \beta(k-k_0)^2]t}} . \quad (4.17)$$

Den Lösungsweg dieses Integrals finden wir im Anhang und die Lösung ist<sup>7</sup>

$$\tilde{\Psi}(x, t) = \frac{K}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\exp\left\{i(k_0x - \omega_0t)\right\}}{\sqrt{\sigma^2 + i\beta t}} \cdot \exp\left\{-\frac{(x - v_g t)^2}{4(\sigma^2 + i\beta t)}\right\} . \quad (4.18)$$

Mit der konjugiert-komplexen Lösung

$$\tilde{\Psi}^*(x, t) = \frac{K}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\exp\left\{-i(k_0x - \omega_0t)\right\}}{\sqrt{\sigma^2 - i\beta t}} \cdot \exp\left\{-\frac{(x - v_g t)^2}{4(\sigma^2 - i\beta t)}\right\}$$

ist dann die unnormierte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Wellenpakets im Ortsraum

$$|\tilde{\Psi}(x, t)|^2 = \frac{K^2}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2}} \cdot \exp\left\{-\frac{\sigma^2(x - v_g t)^2}{2(\sigma^4 + \beta^2 t^2)}\right\} , \quad (4.19)$$

<sup>7</sup>Vergleiche mit: Torsten Fließbach, *Quantenmechanik – Lehrbuch zur Theoretischen Physik III*, 4. Auflage, Elsevier – Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2005, Kapitel 9 Lösung der freien Schrödinger-Gleichung, Seite 65.

denn mit dem Gauß-Integral und den Substitutionen

$$K = \left( \frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad x - v_g t = y, \quad dx = dy$$

liefert das Integral von (4.19) über den Ortsraum nicht 1 sondern

$$\begin{aligned} & \int dx \frac{\sqrt{2\sigma^2/\pi}}{4\pi} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{\sigma^2(x - v_g t)^2}{2(\sigma^4 + \beta^2 t^2)} \right\} \\ &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\sigma^2}{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2}} \cdot \sqrt{\frac{\pi \cdot 2(\sigma^4 + \beta^2 t^2)}{\sigma^2}} = \frac{1}{2\pi}. \end{aligned}$$

Die normierte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Wellenpakets erhalten wir also durch Multiplikation von (4.19) mit  $2\pi$  gemäß

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{\sigma^2(x - v_g t)^2}{2(\sigma^4 + \beta^2 t^2)} \right\} \quad (4.20)$$

und um  $\tilde{\Psi}(x, t)$  zu normieren, müssen wir folglich (4.18) mit  $\sqrt{2\pi}$  multiplizieren:

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{2\pi}}{2\sqrt{\pi}} \cdot \left( \frac{2\sigma^2}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot \frac{\exp \left\{ i(k_0 x - \omega_0 t) \right\}}{\sqrt{\sigma^2 + i\beta t}} \cdot \exp \left\{ -\frac{(x - v_g t)^2}{4(\sigma^2 + i\beta t)} \right\},$$

$$\Psi(x, t) = \left( \frac{\sigma^2}{2\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot \frac{\exp \left\{ i(k_0 x - \omega_0 t) \right\}}{\sqrt{\sigma^2 + i\beta t}} \cdot \exp \left\{ -\frac{(x - v_g t)^2}{4(\sigma^2 + i\beta t)} \right\}.$$

Vergleichen wir den Term  $\exp \left\{ -\frac{\sigma^2(x - v_g t)^2}{2(\sigma^4 + \beta^2 t^2)} \right\}$  in (4.20) mit der Exponentialfunktion  $\exp \left\{ -\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2} \right\}$  der Gauß'schen Normalverteilung, können wir folgendes feststellen:

$$\begin{aligned} v_g t & \text{ entspricht } x_0 \text{ in der Gauß'schen Normalverteilung und} \\ \frac{\sigma^4 + \beta^2 t^2}{\sigma^2} & \text{ entspricht } \sigma^2 \text{ in der Gauß'schen Normalverteilung.} \end{aligned}$$

Das bedeutet einerseits, dass sich der an der Stelle  $v_g t$  gelegene Peak der Gauß-Kurve (4.20) mit der Gruppengeschwindigkeit  $v_g$  längs der  $x$ -Achse bewegt. Andererseits wird die Gauß-Kurve (4.20) mit der Zeit breiter, denn der Term  $\frac{\sigma^4 + \beta^2 t^2}{\sigma^2}$  wird mit der Zeit größer. Wie in der Abbildung 4.1 veranschaulicht, läuft das sich mit der Gruppengeschwindigkeit  $v_g$  fortbewegende Wellenpaket auseinander, während die Norm bzw. der Flächeninhalt unter der Gauß-Kurve erhalten bleibt.

Abschließend berechnen wir die Heisenberg'sche Unschärfe des Wellenpakets in Abhängigkeit von der Zeit:

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int dx \cdot x \cdot |\Psi(x, t)|^2 \\
&= \int dx \cdot x \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{\sigma^2 (x - v_g t)^2}{2(\sigma^4 + \beta^2 t^2)} \right\} \\
&= v_g t,
\end{aligned} \tag{4.21}$$

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int dx \cdot x^2 \cdot |\Psi(x, t)|^2 \\
&= \int dx \cdot x^2 \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{\sigma^2 (x - v_g t)^2}{2(\sigma^4 + \beta^2 t^2)} \right\} \\
&= \frac{\sigma^4 + \beta^2 t^2}{\sigma^2} + v_g^2 t^2,
\end{aligned} \tag{4.22}$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{\frac{\sigma^4 + \beta^2 t^2}{\sigma^2} + v_g^2 t^2 - v_g^2 t^2} = \sqrt{\frac{\sigma^4 + \beta^2 t^2}{\sigma^2}}.$$

$$\begin{aligned}
\langle k \rangle &= \int dk \cdot k \cdot |A(k)|^2 = \int dk \cdot k \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} e^{-2\sigma^2(k-k_0)^2} \\
&= k_0,
\end{aligned} \tag{4.23}$$

$$\begin{aligned}
\langle k^2 \rangle &= \int dk \cdot k^2 \cdot |A(k)|^2 = \int dk \cdot k^2 \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} e^{-2\sigma^2(k-k_0)^2} \\
&= \frac{1}{4\sigma^2} + k_0^2,
\end{aligned} \tag{4.24}$$

$$\Delta k = \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2} = \sqrt{\frac{1}{4\sigma^2} + k_0^2 - k_0^2} = \frac{1}{2\sigma}.$$

Die vollständigen Lösungswege für die Integrale (4.21) bis (4.24) sind im Anhang zu finden.

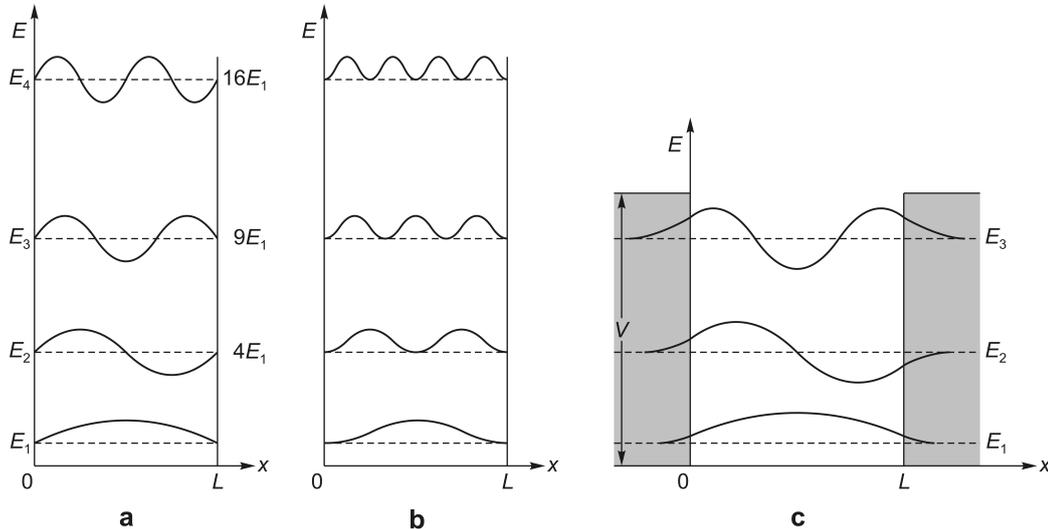
Die von der Zeit abhängige Heisenberg'sche Orts-Impuls-Unschärfe des Wellenpakets ist folglich

$$\Delta x \Delta p = \Delta x \cdot \hbar \Delta k = \sqrt{\frac{\sigma^4 + \beta^2 t^2}{\sigma^2}} \cdot \frac{\hbar}{2\sigma},$$

$$\boxed{\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\beta^2 t^2}{\sigma^4}} \geq \frac{\hbar}{2}},$$

wird mit der Zeit immer größer und geht für  $t \rightarrow \infty$  ebenfalls gegen Unendlich.

## 5 Quantenmechanisches Teilchen im eindimensionalen unendlich hohen Potentialtopf und das Volumen der zweidimensionalen Phasenraumzelle



**Abb. 5.1** Ein quantenmechanisches Teilchen im eindimensionalen Potentialtopf.  
a) *Unendlich* hoher Potentialtopf: Wellenfunktionen  $\Psi_n(x)$  auf den Energieniveaus.  
b) *Unendlich* hoher Potentialtopf: Wahrscheinlichkeitsdichten  $|\Psi_n(x)|^2$  auf den Energieniveaus.  
c) Potentialtopf mit *endlicher* Höhe  $V$ : Wellenfunktionen  $\Psi_n(x)$  auf den Energieniveaus. Man beachte das Funktionsverhalten an den Topfrändern im Vergleich mit den Abbildungen **a** und **b**.

Betrachten wir die eindimensionale Bewegung *eines* Teilchen mit der Masse  $m$  und der Energie  $E = p^2/2m$  entsprechend  $p = \pm\sqrt{2mE}$  in einem unendlich hohen eindimensionalen Potentialtopf der Länge  $L$ . Das Teilchen bewegt sich folglich im zweidimensionalen Phasenraum<sup>1</sup> mit dem Phasenraumvolumen

$$V_{PhR}(E, L) = \int_0^L dx \int_{-\sqrt{2mE}}^{\sqrt{2mE}} dp = 2L\sqrt{2mE} \quad (5.1)$$

und wird an den „Wänden“ des Potentialtopfs reflektiert. Es soll sich um ein *im Innern des Potentialtopfs freies Teilchen* handeln, das dort keinerlei Wechselwirkungen erfährt und demzufolge keine potentielle sondern nur kinetischen Energie besitzt, welche durch die stationäre (zeitunabhängige) Schrödinger-Gleichung bzw. Eigenwertgleichung, also durch den Hamilton-Operator  $\hat{H}$  in Ortsdarstellung wie folgt beschrieben wird:

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \text{bzw.} \quad \hat{H}\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x), \quad (5.2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E\Psi(x). \quad (5.3)$$

<sup>1</sup> Teilchen mit 1 Freiheitsgrad im Ortsraum plus 1 Freiheitsgrad im Impulsraum „lebt“ in einem 2-dimensionalen Phasenraum.

Setzen wir für  $E = \vec{p}^2/(2m) = \hbar^2 \vec{k}^2/(2m) = \hbar^2 k^2/(2m)$ , so erhalten wir aus (5.3) die homogene lineare Differentialgleichung 2. Ordnung

$$\Psi''(x) + k^2 \Psi(x) = 0 .$$

Die zwei linear unabhängigen Basislösungen

$$\Psi_1(x) = e^{ikx} , \quad \Psi_2(x) = e^{i(-k)x} , \quad k > 0$$

bilden gemeinsam die Fundamentalebasis dieser Differentialgleichung.<sup>2</sup> Für  $k < 0$  würden wir die Fundamentalebasis  $\Psi_1(x) = e^{i(-k)x}$ ,  $\Psi_2(x) = e^{ikx}$  erhalten. Wie wir sehen, ergeben sich für negative  $k$  keine neuen Basislösungen, sodass wir uns allein auf die Lösungen für  $k > 0$  beschränken dürfen.

Die Fundamentalebasis liefert schließlich die allgemeine Lösung

$$\Psi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{i(-k)x} , \quad k > 0$$

bzw. im Reellen

$$\Psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) , \quad A, B \in \mathbb{R} , \quad k > 0 .$$

Die Konstanten  $A$  und  $B$  werden aus den Randbedingungen

$$\Psi(0) = 0 , \quad \Psi(L) = 0$$

bestimmt:

$$\begin{aligned} \Psi(0) &= A \cdot 0 + B \cdot 1 = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0 , \\ \Rightarrow \quad \Psi(L) &= A \cdot \sin(kL) + 0 \cdot \cos(kL) = 0 \quad \Rightarrow \\ \sin(kL) &= 0 = \sin(n \cdot \pi) , \quad k > 0 \Rightarrow n \in \mathbb{N} , \quad n > 0 , \end{aligned} \quad (5.4)$$

$$kL = n \cdot \pi \quad \Leftrightarrow$$

$$k = k_n = \frac{\pi}{L} n , \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots .$$

Unter Berücksichtigung der Randbedingungen haben wir somit ein Spektrum von Lösungen

$$\Psi(x) = A \cdot \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) , \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

für die Differentialgleichung (5.3) erhalten. Aus der Normierung

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx \stackrel{!}{=} 1$$

---

<sup>2</sup>Siehe: Lothar Papula, *Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*, Band 2, 10. Auflage, Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden, 2001, Abschnitt 3.3, Seite 487.

ergibt sich schließlich für  $A$  mit  $\int \sin^2 ax \, dx = x/2 - \sin(2ax)/(4a)$  :

$$\int_{x=0}^L |A|^2 \left| \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \right|^2 dx = A^2 \left[ \frac{x}{2} - \frac{1}{4} \frac{L}{n\pi} \cdot \sin\left(2 \frac{n\pi}{L} x\right) \right]_{x=0}^L = A^2 \frac{L}{2} \stackrel{!}{=} 1 ,$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} .$$

Die Lösungen (Eigenfunktionen)<sup>3</sup>  $\Psi_n(x)$  der Eigenwertgleichung (5.2) für ein im Innern eines unendlich hohen eindimensionalen Potentialtopfs der Breite  $L$  freies Teilchen sind folglich

$$\boxed{\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right)}$$

und die Eigenwertgleichung erhält damit die Form

$$\hat{H} \Psi_n(x) = \hat{H} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) = E_n \Psi_n(x) = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \Psi_n(x) , \quad n = 1, 2, 3 \dots .$$

Im unendlich hohen eindimensionalen Potentialtopf befinde sich nur 1 Teilchen mit der kinetischen Energie  $E = \text{const.}$  Die dann maximal mögliche Quantenzahl  $n_{max}$  ergibt sich aus (5.1) und aus der Gleichung (5.6):

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_{max}^2}{2mL^2} \Leftrightarrow n_{max} = \frac{\sqrt{2mE}}{\pi \hbar} L = \frac{2 \cdot L \sqrt{2mE}}{2 \cdot \pi \hbar} = \frac{V_{PhR}}{2\pi \hbar} . \quad (5.5)$$

Im diesem Fall ist  $n_{max}$  aber gerade die Anzahl der Energiequantenzustände im Phasenraumvolumen des Teilchens unter der Bedingung  $0 < E_n \leq E$ . Das wiederum bedeutet, dass  $2\pi\hbar$  das **Volumen einer zweidimensionalen Phasenraumzelle** ist, also das Phasenraumvolumen, welches von jeweils einem Zustand im zweidimensionalen Phasenraum eingenommen wird.<sup>4</sup>

### Schlussfolgerung, Besetzung der Energieniveaus:

- Im Innern des vorgegebenen Potentialtopfs kommen nur Teilchen vor, deren Zustand durch eine der Eigenfunktionen  $\Psi_n(x)$  beschrieben wird und die die entsprechenden Eigenenergiewerte  $E_n$  besitzen. Jedes Teilchen muss also einen der folgenden Energieeigenwerte besitzen, um im Potentialtopf existieren zu können:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} = \frac{\hbar^2}{2m} k_n^2 \quad \text{mit} \quad k_n = \frac{\pi n}{L} , \quad n = 1, 2, 3, \dots . \quad (5.6)$$

Jedes Energieniveau  $E_n$  kann zwar von beliebig vielen Bosonen aber gemäß dem Pauli-Prinzip nur von *maximal zwei* Fermion besetzt werden.

<sup>3</sup>Lösungen der Differentialgleichung (5.2) bzw. dieses Eigenwertproblems sind aber auch alle möglichen Linearkombinationen der Eigenfunktionen  $\Psi_n(x)$ .

<sup>4</sup>Vergleiche mit dem Kapitel 12 *Mikrokanonische Ensembles* in meinem Skript *Grundlegendes zur Statistischen Physik – Ensembles und Verteilungen*.

- **Bosonen** wie beispielsweise Photonen und Atomkerne mit gerader Nukleonenzahl besitzen einen ganzzahligen Spin. **Fermionen** wie beispielsweise Elektronen, Protonen und Neutronen besitzen einen halbzahligen Spin.
- Das **Pauli-Prinzip** oder **Ausschließungsprinzip** besagt, dass sich zwei Fermionen niemals im gleichen Quantenzustand befinden können. Deshalb müssen beispielsweise die zwei Elektronen auf dem gleichen Energieniveau  $E_n$  *verschiedene* Elektronen-Spin-Zustände einnehmen. Die beiden möglichen verschiedenen Elektronen-Spin-Zustände sind
  - (↑) **Spin-Up** mit der magnetischen Spinquantenzahl  $m_s = +\frac{1}{2}$ ,
  - (↓) **Spin-Down** mit der magnetischen Spinquantenzahl  $m_s = -\frac{1}{2}$ .
- Wird eines der Teilchen im Potentialtopf angeregt und ihm dabei die Energie  $\Delta E = E_{n+1} - E_n$  zugeführt, springt es vom Eigenzustand  $\Psi_n$  mit dem Energieniveau  $E_n$  in den Eigenzustand  $\Psi_{n+1}$  mit dem Energieniveau  $E_{n+1}$ . Umgekehrt springt das Teilchen bei Energieabgabe in ein entsprechend tieferes Energieniveau.

## Beispiel

Wir betrachten ein quantenmechanisches Teilchensystem im eindimensionalen, unendlich hohen Potentialtopf der Breite  $L$ . Das System befinde sich im **reinen Zustand**

$$\langle x|\Psi\rangle = \Psi(x) = C \cos^2\left(\frac{\pi}{L}x\right).$$

$|\Psi\rangle$  sei kein Eigenvektor. Folglich ist  $\Psi(x)$  auch keine Eigenfunktion. Das Potential innerhalb des Topfs sei  $V(x) = 0$  und die Teilchenbewegung soll auf das Ortsintervall  $[-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$  beschränkt sein. Die Teilchenmasse sei  $m$ .

Wegen der Ortsraumbeschränkung des Systems sind die Impuls- bzw. Energieeigenfunktionen diskretisiert mit dem entsprechenden zugehörigen diskreten Eigenwertespektrum. Lediglich die zur Ortsdarstellung der diskreten Größen erforderliche Basis aus den Ortseigenfunktionen ist kontinuierlich.

Zunächst normieren wir  $\Psi(x)$  durch die Festlegung der Konstante  $C$ . Dazu benötigen wir eine leichter zu integrierende Darstellung von  $\cos^4\left(\frac{\pi}{L}x\right)$  entsprechend

$$\begin{aligned} \cos(2\alpha) &= \cos^2\alpha - \sin^2\alpha \\ \cos^2\alpha &= \cos(2\alpha) + 1 - \cos^2\alpha \\ 2\cos^2\alpha &= 1 + \cos(2\alpha) \\ \cos^2\alpha &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos(2\alpha) \\ \cos^4\alpha &= \frac{1}{4} + \frac{1}{2}\cos(2\alpha) + \frac{1}{4} \cdot \underbrace{\cos^2(2\alpha)}_{\text{mit (5.7)}} \\ &= \frac{1}{4} + \frac{1}{2}\cos(2\alpha) + \frac{1}{4} \cdot \overbrace{\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\cos(4\alpha)\right]} \\ \cos^4\alpha &= \frac{1}{8} \left[3 + 4\cos(2\alpha) + \cos(4\alpha)\right]. \end{aligned} \tag{5.7}$$

Normierung von  $\Psi(x)$ :

$$\begin{aligned} 1 &\stackrel{!}{=} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx |\Psi(x)|^2 = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx |C|^2 \cdot \left| \cos^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) \right|^2 = |C|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \cos^4\left(\frac{\pi}{L}x\right) \\ &= |C|^2 \cdot \frac{1}{8} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \left[3 + 4\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right) + \cos\left(\frac{4\pi}{L}x\right)\right] \\ &= |C|^2 \cdot \frac{1}{8} \left[3x + \frac{2L}{\pi} \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) + \frac{L}{4\pi} \sin\left(\frac{4\pi}{L}x\right)\right]_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} \\ 1 &= |C|^2 \cdot \frac{3L}{8} \quad \Rightarrow \quad C = \sqrt{\frac{8}{3L}}, \end{aligned}$$

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{8}{3L}} \cos^2\left(\frac{\pi}{L}x\right).$$

Analog zu dem in diesem Kapitel bereits gezeigten Rechenweg werden wir jetzt die energetischen Verhältnisse für ein Teilchen in diesem System beschreiben. Der „Energieoperator“ ist der Hamilton-Operator  $\hat{H}$ , der für den stationären Fall in Ortsdarstellung und für  $V(x) = 0$  die Form

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

hat und somit nur die kinetische Energie im System beschreibt. Die zum Hamilton-Operator gehörenden Energieeigenzustände  $|\psi_n\rangle$  des Systems sind in Ortsdarstellung die Energieeigenfunktionen

$$\langle x|\psi_n\rangle = \psi_n(x),$$

die in ihrer Gesamtheit eine VON-Basis zur Entwicklung des Zustands  $|\Psi\rangle$  bilden, wie wir noch sehen werden.

Die Energieeigenfunktionen  $\psi_n(x)$  sind die Lösungen der sich aus dem entsprechenden Hamilton-Operator ergebenden Schrödinger-Gleichung, die in diesem Fall auch gleichzeitig die Eigenwertgleichung

$$\begin{aligned} \hat{H}|\psi\rangle &= E|\psi\rangle \\ H(x)\psi(x) &= E\psi(x) \Rightarrow \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) &= E_n \psi_n(x) = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} \psi_n(x) \end{aligned}$$

ist und das diskrete Energieeigenwertspektrum  $\{E_n\}$  liefert. Lösen wir also die Differentialgleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(x) \tag{5.8}$$

mit dem Exponentialansatz<sup>5</sup>

$$\psi(x) = e^{\pm ikx}.$$

Mit

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) &= k^2 \psi(x) \\ \Rightarrow k^2 \psi(x) &= k^2 \psi(x) \end{aligned}$$

haben wir bereits die allgemeine Lösung von (5.8) gefunden:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \\ &= C_1 [\cos(kx) + i \sin(kx)] + C_2 [\cos(kx) - i \sin(kx)] \\ &= (C_1 + C_2) \cos(kx) + (iC_1 - iC_2) \sin(kx) \Rightarrow \end{aligned}$$

---

<sup>5</sup>Die Exponentialfunktion  $e^{ikx}$  ist die zu der ebenen Welle  $e^{i(kx-\omega t)}$  gehörende Funktion für  $t = 0$ .

$$\boxed{\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)} .$$

Aus der Forderung nach der Stetigkeit der Zustandsfunktionen ergeben sich die Randbedingungen

$$\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi\left(\frac{L}{2}\right) = 0 ,$$

womit wir die spezielle Lösung der Differentialgleichung bzw. die Eigenfunktionen  $\psi_n(x)$  ermitteln können. Die Randbedingungen sind nämlich nur für bestimmte Werte von  $k$  erfüllt.

Mit  $\cos(-\alpha) = \cos(\alpha)$  gilt im Fall der *geraden Energieeigenfunktionen*  $\psi_n^\oplus$ :

$$A \cos\left[k \cdot \left(\pm \frac{L}{2}\right)\right] + B \sin\left[k \cdot \left(\pm \frac{L}{2}\right)\right] = 0 \quad \text{für}$$

$$k \cdot \left(\pm \frac{L}{2}\right) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \pi \quad \Leftrightarrow \quad k_n = \pm \frac{2\pi}{L} \left(n + \frac{1}{2}\right) , \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

$$\text{und } B = 0 ,$$

sodass

$$\psi_n^\oplus(x) = A \cos\left[\frac{2\pi}{L} \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot x\right] .$$

Wir haben für die geraden Eigenfunktionen nur positive  $n$  zugelassen, weil negative  $n$  zum gleichen Vorzeichen führen wie positive. Die Normierung unter Verwendung von  $\int \cos^2 ax \, dx = \frac{x}{2} + \frac{1}{4a} \sin(2ax)$  ergibt schließlich

$$1 \stackrel{!}{=} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \left|\psi_n^\oplus(x)\right|^2 = |A|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \cos^2\left[\frac{2\pi}{L} \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot x\right] = |A|^2 \cdot \frac{L}{2} \quad \Rightarrow$$

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} ,$$

$$\boxed{\psi_n^\oplus(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left[\frac{2\pi}{L} \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot x\right] , \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots} .$$

Und mit  $\sin(-\alpha) = -\sin(\alpha)$  gilt im Fall der *ungeraden Energieeigenfunktionen*  $\psi_n^\ominus$ :

$$A \cos\left[k \cdot \left(\pm \frac{L}{2}\right)\right] + B \sin\left[k \cdot \left(\pm \frac{L}{2}\right)\right] = 0 \quad \text{für}$$

$$k \cdot \left(\pm \frac{L}{2}\right) = n \cdot \pi \quad \Leftrightarrow \quad k_n = \pm \frac{2\pi}{L} n , \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

$$\text{und } A = 0 ,$$

sodass

$$\psi_n^\ominus(x) = B \sin\left[\frac{2\pi}{L} n \cdot x\right] .$$

Wir haben für die ungeraden Eigenfunktionen ebenfalls nur positive  $n$  zugelassen, weil negative  $n$  nur zu einer physikalisch nicht relevanten Vorzeichenumkehr der Eigenfunktionen führen. Physikalisch beobachtbar sind nämlich nicht die Eigenfunktionen selbst sondern nur ihr Betragsquadrat, die Wahrscheinlichkeitsdichte. Das Betragsquadrat ist aber unabhängig vom Vorzeichen der Eigenfunktionen. Außerdem haben wir für die ungeraden Eigenfunktionen  $n = 0$  ausgeschlossen, weil  $n = 0$  den trivialen Fall  $\psi_n^\ominus(0) \equiv 0$  und damit energie- bzw. impulsfreie Teilchen ergeben würde. Diese sind aber nicht mit der Heisenberg'schen Unschärferelation vereinbar. Die Normierung unter Verwendung von  $\int \sin^2 ax \, dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4a} \sin(2ax)$  ergibt schließlich

$$1 \stackrel{!}{=} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx |\psi_n^\ominus(x)|^2 = |B|^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \sin^2 \left[ \frac{2\pi}{L} n \cdot x \right] = |B|^2 \cdot \frac{L}{2} \Rightarrow$$

$$B = \sqrt{\frac{2}{L}},$$

$$\psi_n^\ominus(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \left[ \frac{2\pi}{L} n \cdot x \right], \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Damit sind alle Energieeigenfunktionen  $\psi_n(x)$  normiert. Dass die geraden und ungeraden Eigenfunktionen gemäß

$$\int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \underbrace{\psi_m^{\oplus*} \psi_n^\ominus}_{\text{ungerade}} = 0, \quad m, n \in \mathbb{N}$$

zueinander orthogonal sind, ergibt sich aus der Tatsache, dass das Integral über eine ungerade Funktion, die symmetrisch zum Koordinatenursprung liegt und dort sowie an den Integrationsgrenzen verschwindet, gleich Null ist. Aber auch verschiedene gerade Eigenfunktionen sind zueinander orthogonal und ebenso verschiedene ungerade Eigenfunktionen, wie man sich an entsprechenden Beispielrechnungen veranschaulichen kann.

Alle geraden und ungeraden Energieeigenfunktionen bilden gemeinsam eine VON-Basis, spannen also den zum Hamilton-Operator  $\hat{H} := H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$  gehörenden Hilbert-Raum  $\mathcal{H}$  auf.

Der Zustand  $|\Psi\rangle$  lässt sich nach der VON-Basis  $\{|\psi_n^\oplus\rangle, |\psi_n^\ominus\rangle\}$ , bestehend aus allen Energieeigenfunktionen, wie folgt entwickeln:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\psi_n^\oplus\rangle \underbrace{\langle \psi_n^\oplus | \Psi \rangle}_{c_n^\oplus} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^\oplus |\psi_n^\oplus\rangle.$$

Warum in diesem Fall für die Entwicklung nur die geraden Eigenfunktionen Verwendung finden, werden wir gleich sehen. Die Entwicklungskoeffizienten  $c_n$  in Ortsdar-

stellung sind

$$c_n = \langle \psi_n | \Psi \rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \langle \psi_n | x \rangle \langle x | \Psi \rangle = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \psi_n^*(x) \Psi(x).$$

Bezüglich der ungeraden Eigenfunktionen  $\psi_n^\ominus$  bedeutet das

$$c_n^\ominus = \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \underbrace{\sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L} n \cdot x\right)}_{\text{ungerade Funktion}} \cdot \underbrace{\sqrt{\frac{8}{3L}} \cos^2\left(\frac{\pi}{L} \cdot x\right)}_{\text{gerade Funktion}} = 0.$$

Der Integrand ist insgesamt eine ungerade Funktion, sodass das Integral verschwindet. Wir brauchen also die Entwicklungskoeffizienten bezüglich der ungeraden Eigenfunktionen nicht zu berücksichtigen.

Die Entwicklungskoeffizienten bezüglich der geraden Eigenfunktionen  $\psi_n^\oplus$  sind

$$\begin{aligned} c_n^\oplus &= \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left[\frac{2\pi}{L} \left(n + \frac{1}{2}\right) x\right] \cdot \sqrt{\frac{8}{3L}} \cos^2\left(\frac{\pi}{L} x\right) \\ &= \frac{4}{L\sqrt{3}} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \cos\left[\frac{2\pi}{L} \left(n + \frac{1}{2}\right) x\right] \cdot \cos^2\left(\frac{\pi}{L} x\right) \\ c_n^\oplus &= -\frac{16 \cos(n\pi)}{\sqrt{3} \pi (8n^3 + 12n^2 - 2n - 3)}. \end{aligned}$$

Die Integration wurde mit einem entsprechenden Mathematikprogramm ausgeführt.

Bei der Messung der (kinetischen) Energie des quantenmechanischen Teilchens im Zustand  $|\Psi\rangle := \Psi(x)$  im eindimensionalen, unendlich hohen Potentialtopf können nur Energieeigenwerte  $E_n$  gemessen werden – mit der zugehörigen Wahrscheinlichkeit  $p_n = |c_n|^2$ . Die drei niedrigsten Eigenenergien mit ihren entsprechenden Eigenfunktionen und Wahrscheinlichkeiten sind:

---


$$\begin{aligned} k_0^\oplus &= \frac{\pi}{L}, & E_0^\oplus &= \frac{(\hbar k_0^\oplus)^2}{2m}, & \psi_0^\oplus(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi}{L} x\right), & |c_0^\oplus|^2 &= \frac{256}{27\pi^2} \approx 0,961 \\ k_1^\ominus &= \frac{2\pi}{L}, & E_1^\ominus &= \frac{(\hbar k_1^\ominus)^2}{2m}, & \psi_1^\ominus(x) &\equiv 0, & |c_1^\ominus|^2 &= 0 \\ k_1^\oplus &= \frac{3\pi}{L}, & E_1^\oplus &= \frac{(\hbar k_1^\oplus)^2}{2m}, & \psi_1^\oplus(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{3\pi}{L} x\right), & |c_1^\oplus|^2 &= \frac{256}{675\pi^2} \approx 0,038 \end{aligned}$$


---

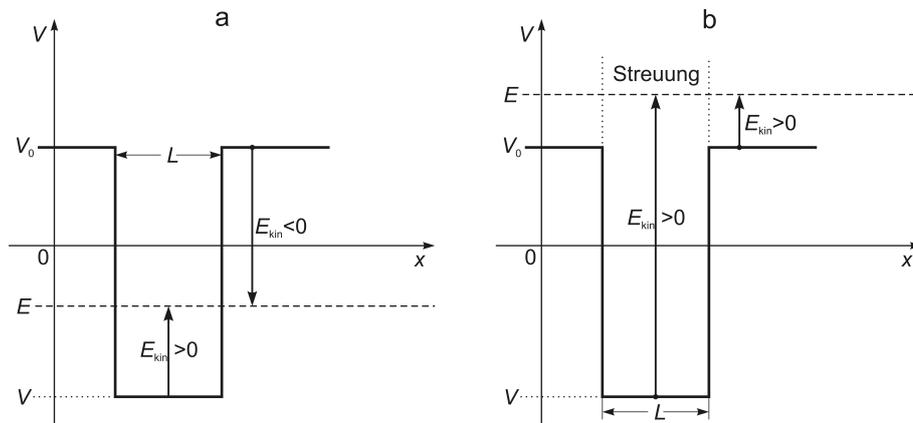
Wenn sich das quantenmechanische System in dem gegebenen Zustand  $|\Psi\rangle$  befindet, ist die quantenmechanische Wahrscheinlichkeit, ein Teilchen in den drei niedrigsten Eigenenergieniveaus anzutreffen, annähernd 0,999. Folglich ist die Wahrscheinlichkeit, Teilchenenergien oberhalb der drei niedrigsten Energieniveaus zu messen, mit annähernd  $1 - 0,999 = 0,001$  verschwindend gering.

## 6 Quantenmechanisches Teilchen mit endlichem, stückweise konstantem Potential

Ein quantenmechanisches Teilchen mit der Gesamtenergie  $E$  bewege sich entlang der Ortsraumachse  $x$  unter dem Einfluss des Potentials  $V(x)$ . Wegen der Energieerhaltung gilt für die Gesamtenergie  $E$  des Teilchens

$$E = E_{\text{kin}} + V(x) = \text{const}, \quad \text{klassisch } E_{\text{kin}} \geq 0.$$

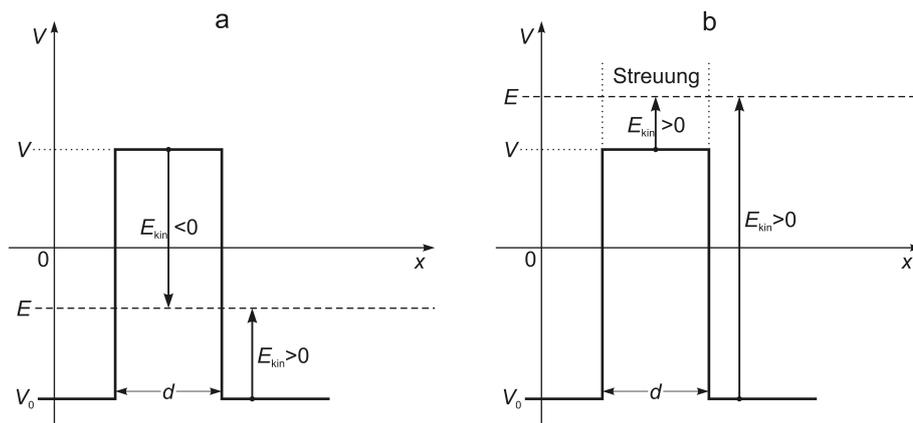
Die beiden folgenden Abbildungen veranschaulichen diese Problematik an den zwei einfachen Standardbeispielen eindimensionaler Potentialtopf und eindimensionale Potentialbarriere. Innerhalb von Topf und Barriere gilt  $E_{\text{kin}} = E - V$  und außerhalb von Topf und Barriere gilt  $E_{\text{kin}} = E - V_0$ .



**Abb. 6.1** Eindimensionaler Potentialtopf der Breite  $L$  und der Tiefe  $V_0 - V$ :

a)  $E < V_0 \Rightarrow$  Das Gebiet innerhalb des Topfs ist wegen  $E_{\text{kin}} > 0$  klassisch erlaubt und das Gebiet außerhalb des Tops ist wegen  $E_{\text{kin}} < 0$  klassisch nicht erlaubt.

b)  $E > V_0 \Rightarrow$  Die Gebiete innerhalb und außerhalb des Topfs sind wegen  $E_{\text{kin}} > 0$  klassisch erlaubt. Beim Potentialtopf handelt es sich um ein **attraktives Potential**, d. h., über dem Topf nimmt die kinetische Energie des Teilchens zu und es resultieren entsprechende Streuzustände.



**Abb. 6.2** Eindimensionale Potentialbarriere der Breite  $d$  und der Höhe  $V - V_0$ :

a)  $E < V \Rightarrow$  Das Gebiet innerhalb der Barriere ist wegen  $E_{\text{kin}} < 0$  klassisch nicht erlaubt und das Gebiet außerhalb der Barriere ist wegen  $E_{\text{kin}} > 0$  klassisch erlaubt.

b)  $E > V \Rightarrow$  Die Gebiete innerhalb und außerhalb der Barriere sind wegen  $E_{\text{kin}} > 0$  klassisch erlaubt. Bei der Potentialbarriere handelt es sich um ein **repulsives Potential**, d. h., über der Barriere nimmt die kinetische Energie des Teilchens ab und es resultieren die entsprechenden Streuzustände.

Lösen wir also die stationäre SGL für endliche, stückweise konstante Potentiale  $V(x) = V$  wieder mit dem Exponentialansatz  $\Psi(x) = e^{\mu x}$ :

$$\text{stationäre SGL : } -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V \cdot \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$$

$$\iff \Psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \cdot \Psi = 0,$$

$$\mu^2 \cdot e^{\mu x} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \cdot e^{\mu x} = 0 \implies$$

$$\mu = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V - E)},$$

$$\text{allgemeine Lösung : } \Psi(x) = C_1 e^{+\sqrt{(V-E)2m/\hbar^2} x} + C_2 e^{-\sqrt{(V-E)2m/\hbar^2} x}.$$

Wie aus den Abbildungen 6.1 und 6.2 hervorgeht, können wir jetzt zwei Fälle unterscheiden:

- $V - E < 0$  bzw.  $E > V$ , d. h. **klassisch erlaubt**:

$$\Psi(x) = C_1 e^{+i\sqrt{(E-V)2m/\hbar^2} x} + C_2 e^{-i\sqrt{(E-V)2m/\hbar^2} x}$$

bzw.

$$\boxed{\Psi(x) = C_1 e^{+ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad \text{mit} \quad k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (E - V), \quad k \in \mathbb{R}}.$$

Die Lösungen der stationären SGL für ein quantenmechanisches Teilchen in einem klassisch erlaubten Gebiet sind **oszillatorische Lösungen** (Wellenfunktionen).

- $V - E > 0$  bzw.  $E < V$ , d. h. **klassisch nicht erlaubt**:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= C_1 e^{+\sqrt{(V-E)2m/\hbar^2} x} + C_2 e^{-\sqrt{(V-E)2m/\hbar^2} x} \\ &= C_1 e^{+i\sqrt{(E-V)2m/\hbar^2} x} + C_2 e^{-i\sqrt{(E-V)2m/\hbar^2} x}. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Für

$$(E - V) < 0 \implies \left( \sqrt{(E - V) 2m/\hbar^2} \right)^2 = k^2 \equiv -\kappa^2 \implies k \equiv i\kappa$$

folgt aus (6.1)

$$\Psi(x) = C_1 e^{+i(i\kappa)x} + C_2 e^{-i(i\kappa)x}$$

bzw.

$$\boxed{\Psi(x) = C_1 e^{-\kappa x} + C_2 e^{+\kappa x} \quad \text{mit} \quad \kappa^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (V - E), \quad \kappa \in \mathbb{R}}.$$

Wie man sieht, ist die Wellenzahl  $k \equiv i\kappa$  in einem klassisch nicht erlaubten Gebiet rein imaginär und die Lösungen der stationären SGL für ein quantenmechanisches Teilchen werden zu **Exponentialfunktionen**. Man beachte die Vorzeichenumkehr im Exponenten der e-Funktionen im Vergleich zu den oszillatorischen Lösungen.

## 6.1 Potentialbarriere – Tunneleffekt

Der Tunneleffekt ist rein quantenmechanischer Natur, also klassisch nicht zu erklären. Ein einfaches Modell zur prinzipiellen Beschreibung des Tunneleffekts ist die eindimensionale rechteckige Potentialbarriere. Auf diese Barriere sollen quantenmechanische Teilchen „prallen“, die sich in die positive Richtung, also von links kommend, längs der  $x$ -Achse bewegen. Das bedeutet, dass die Gesamtenergie  $E$  der Teilchen kleiner sein muss als das Potential  $V$  der Barriere. Das Potential zu beiden Seiten der Potentialbarriere sei der Einfachheit halber gleich Null, so dass die Teilchen außerhalb der Barriere frei sind. Für derartige freie Teilchen hatten wir die folgende allgemeine Lösung der SGL hergeleitet:

$$\Psi(x) = C_1 e^{+ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad \text{mit} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad V = 0.$$

Obwohl das Eindringen der Teilchen in das Gebiet der Potentialbarriere klassisch verboten ist, hat die SGL innerhalb der Barriere die allgemeine Lösung

$$\Psi(x) = C_1 e^{-\kappa x} + C_2 e^{+\kappa x} \quad \text{mit} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}, \quad V - E > 0.$$

Links der Potentialbarriere sei das Gebiet I, innerhalb der Barriere das Gebiet II und rechts davon das Gebiet III. Die Barriere reiche von  $x = -a$  bis  $x = a$ . Sie hat also die Breite  $d = 2a$ .

Betrachten wir die Lösungen (Wahrscheinlichkeitsamplituden) der stationären SGL eines von links einlaufenden quantenmechanischen Teilchens der Masse  $m$  in den drei Gebieten (s. Abb. 6.3):

- **Gebiet I**  $x < -a$  :

$$\Psi_{\text{I}}(x) = A \cdot e^{+ikx} + B \cdot e^{-ikx}, \quad k = \frac{+\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad V = 0.$$

$A e^{+ikx}$  beschreibt die einlaufende Welle und  $B e^{-ikx}$  die an der Barriere reflektierte Welle. Die Amplitude  $A$  der einlaufenden Welle sei bekannt.

- **Gebiet II**  $-a \leq x \leq a$  :

$$\Psi_{\text{II}}(x) = C \cdot e^{-\kappa x} + D \cdot e^{+\kappa x}, \quad \kappa = \frac{+\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}, \quad V - E > 0.$$

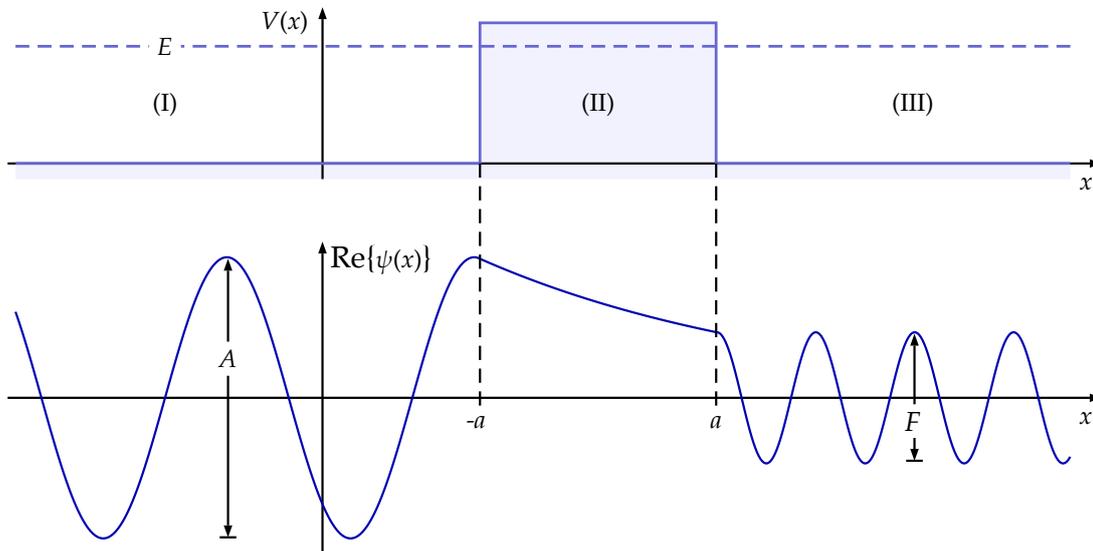
$C e^{-\kappa x}$  ist gleichsam die nach rechts in die Barriere „einlaufende Exponentialfunktion“ und  $D e^{+\kappa x}$  kann man als die an der rechten Grenze der Barriere „reflektierte Exponentialfunktion“ ansehen.

- **Gebiet III**  $x > a$  :

$$\Psi_{\text{III}}(x) = F \cdot e^{+ikx} + G \cdot e^{-ikx}, \quad k = \frac{+\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad V = 0.$$

$F e^{+ikx}$  beschreibt die auslaufende Welle und  $G e^{-ikx}$  allgemein die reflektierte Welle. Weil in unserem Modell aber eine reflektierte Welle im Gebiet III nicht existiert, werden wir am Ende der allgemein durchgeführten Rechnungen  $G = 0$  setzen.

Weil die Gesamtenergie  $E$  der Teilchen konstant ist (Energieerhaltung!), besitzen die Teilchen im Gebiet III die gleiche kinetische Energie wie im Gebiet I und folglich auch die gleiche Geschwindigkeit  $v_g = \frac{\hbar k}{m}$ .



**Abb. 6.3** Darstellung der Lösungsfunktionen (Materiewellenfunktionen)  $\Psi(x)$  der stationären SGL für ein von links einfallendes quantenmechanisches Teilchen der Gesamtenergie  $E$  in Abhängigkeit vom Potential  $V(x)$ . In den Gebieten I und III sei das Potential Null. Das Gebiet II entspreche der Potentialbarriere  $V > E$ . **Anmerkung:**  $\text{Re}\{\Psi(x)\}$  sollte im Gebiet III die gleiche Periode besitzen wie im Gebiet I, weil für die Wellenzahlen dort  $k(\text{III}) = k(\text{I})$  gilt.

Quelle: [http://www.semibyte.de/wp/download/graphicslib/physics/tunneleffekt\\_wellenfunktion\\_und\\_potential\\_2.png](http://www.semibyte.de/wp/download/graphicslib/physics/tunneleffekt_wellenfunktion_und_potential_2.png)

Die Randbedingungen oder besser gesagt die Anschlussbedingungen für die Lösungsfunktionen an den Grenzen  $x = -a$  und  $x = a$  der Potentialbarriere sind

$$\Psi_{\text{I}}(-a) = \Psi_{\text{II}}(-a) \quad \Rightarrow \quad (1) \quad A e^{-ika} + B e^{ika} = C e^{\kappa a} + D e^{-\kappa a},$$

$$\frac{d\Psi_{\text{I}}(-a)}{dx} = \frac{d\Psi_{\text{II}}(-a)}{dx} \quad \Rightarrow \quad (2) \quad ik(A e^{-ika} - B e^{ika}) = -\kappa(C e^{\kappa a} - D e^{-\kappa a}),$$

$$\Psi_{\text{II}}(a) = \Psi_{\text{III}}(a) \quad \Rightarrow \quad (3) \quad C e^{-\kappa a} + D e^{\kappa a} = F e^{ika} + G e^{-ika},$$

$$\frac{d\Psi_{\text{II}}(a)}{dx} = \frac{d\Psi_{\text{III}}(a)}{dx} \quad \Rightarrow \quad (4) \quad -\kappa(C e^{-\kappa a} - D e^{\kappa a}) = ik(F e^{ika} - G e^{-ika}).$$

Auf Grund der Anschlussbedingungen ist die Lösung  $\Psi_{\text{III}}$  über  $\Psi_{\text{II}}$  abhängig von der Lösung  $\Psi_{\text{I}}$ . Deshalb erhalten wir zwei voneinander abhängige, inhomogene lineare Gleichungssysteme jeweils aus zwei Gleichungen mit zwei Unbekannten, die uns am Ende die gesuchten Beziehungen zwischen  $A$ ,  $B$  und  $F$ ,  $G$  liefern.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Alternativ zur jetzt folgenden Rechnung findet man gute Hinweise für eine entsprechende Rechnung „zu Fuß“ in: Gunnar Lindström, Rudolf Langkau, Wolfgang Scobel, *Physik kompakt 3 – Quantenphysik und Statistische Physik*, 2. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2002, Seite 147 bis Seite 149. Leider sind dort die Amplituden  $A_2$  und  $B_2$  der Lösungsfunktion für das Gebiet II (innerhalb der Barriere) vertauscht, was aber glücklicherweise keinen Einfluss auf das Ergebnis hat.

Wegen der Übersichtlichkeit der Matrixschreibweise werden wir im Folgenden die Rechnung aus dem Lehrbuch von Franz Schwabl, *Quantenmechanik (QMI)*, 6. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2002, Seite 63 bis Seite 66 übernehmen. Zunächst formen wir die Anschlussbedingungsgleichung (2) um und erhalten für  $-a$

$$\begin{aligned} A e^{-ika} + B e^{ika} &= C e^{\kappa a} + D e^{-\kappa a}, \\ A e^{-ika} - B e^{ika} &= \frac{i\kappa}{k} (C e^{\kappa a} - D e^{-\kappa a}). \end{aligned}$$

Dies ergibt in Matrixschreibweise

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{ika} \end{pmatrix}}_{\text{Matrix } Q} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & e^{-\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k} e^{\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k} e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{ika} \\ e^{-ika} & -e^{-ika} \end{pmatrix}}_{\text{zu } Q \text{ inverse Matrix } Q^{-1}} \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & e^{-\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k} e^{\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k} e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix},$$

also  $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$  mit (6.2)

$$M(-a) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a + ika} & \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a + ika} \\ \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a - ika} & \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a - ika} \end{pmatrix}.$$

Jetzt formen wir in analoger Weise auch die Anschlussbedingungsgleichung (4) um und erhalten für  $a$

$$\begin{aligned} C e^{-\kappa a} + D e^{\kappa a} &= F e^{ika} + G e^{-ika}, \\ \frac{i\kappa}{k} (C e^{-\kappa a} - D e^{\kappa a}) &= F e^{ika} - G e^{-ika}. \end{aligned}$$

Dies ergibt in Matrixschreibweise

$$\underbrace{\begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ e^{ika} & -e^{-ika} \end{pmatrix}}_{\text{Matrix } W} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & e^{\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k} e^{-\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k} e^{\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \underbrace{\frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{-ika} \\ e^{ika} & -e^{ika} \end{pmatrix}}_{\text{zu } W \text{ inverse Matrix } W^{-1}} \begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & e^{\kappa a} \\ \frac{i\kappa}{k} e^{-\kappa a} & -\frac{i\kappa}{k} e^{\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix},$$

also  $\boxed{\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = M(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}}$  mit

$$M(a) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a - ika} & \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a - ika} \\ \left(1 - \frac{i\kappa}{k}\right) e^{-\kappa a + ika} & \left(1 + \frac{i\kappa}{k}\right) e^{\kappa a + ika} \end{pmatrix}.$$

Die Inverse zur Matrix  $M(a)$  ist

$$\left(M(a)\right)^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{i\kappa}{\kappa}\right) e^{\kappa a + ika} & \left(1 + \frac{i\kappa}{\kappa}\right) e^{\kappa a - ika} \\ \left(1 + \frac{i\kappa}{\kappa}\right) e^{-\kappa a + ika} & \left(1 - \frac{i\kappa}{\kappa}\right) e^{-\kappa a - ika} \end{pmatrix}.$$

Mit ihr erhalten wir den Zusammenhang zwischen  $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$  und  $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$  wie folgt:

$$\begin{aligned} \left(M(a)\right)^{-1} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} &= \left(M(a)\right)^{-1} M(a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \stackrel{(6.2)}{\implies} \\ \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= M(-a) \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = M(-a) \left(M(a)\right)^{-1} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &M(-a) \left(M(a)\right)^{-1} \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \left[ (2 + i\varepsilon) e^{2\kappa a} + (2 - i\varepsilon) e^{-2\kappa a} \right] e^{2ika} & i\eta e^{2\kappa a} - i\eta e^{-2\kappa a} \\ -i\eta e^{2\kappa a} + i\eta e^{-2\kappa a} & \left[ (2 - i\varepsilon) e^{2\kappa a} + (2 + i\varepsilon) e^{-2\kappa a} \right] e^{-2ika} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

wobei wir zur Vereinfachung die Substitutionen

$$\varepsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}, \quad \eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}$$

eingeführt haben. Berücksichtigen wir außerdem die Beziehungen

$$e^x + e^{-x} = 2 \cosh x, \quad e^x - e^{-x} = 2 \sinh x,$$

können wir die Matrix  $M(-a) \left(M(a)\right)^{-1}$  kompakter schreiben und der **allgemeine Zusammenhang** zwischen  $\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$  und  $\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$  erhält die Gestalt

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left[ \cosh(2\kappa a) + \frac{i\varepsilon}{2} \sinh(2\kappa a) \right] e^{2ika} & \frac{i\eta}{2} \sinh(2\kappa a) \\ -\frac{i\eta}{2} \sinh(2\kappa a) & \left[ \cosh(2\kappa a) - \frac{i\varepsilon}{2} \sinh(2\kappa a) \right] e^{-2ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}.$$

In unserem speziellen Modell zur Erklärung des Tunneleffekts sollen Teilchen aber nur von links (und nicht auch von rechts) einlaufen, sodass  $G$  verschwindet und wir die beiden Beziehungen

$$\begin{aligned} A &= F \cdot \left[ \cosh(2\kappa a) + \frac{i\varepsilon}{2} \sinh(2\kappa a) \right] e^{2ika} , \\ B &= F \cdot \left( -\frac{i\eta}{2} \right) \sinh(2\kappa a) \end{aligned}$$

erhalten.

Im Zusammenhang mit dem Tunneleffekt interessiert uns eigentlich nur der Anteil an den von links in das Gebiet I einfallenden Teilchen, der pro Zeit- und Flächeneinheit durch die Potentialbarriere hindurch in das Gebiet III transmittiert wird. Dieser Anteil ist gleich dem **Transmissionskoeffizienten**  $T$ . Was im klassisch verbotenen Gebiet II vor sich geht, ist „imaginär“ und praktisch nicht relevant. Wegen der Teilchenzahlerhaltung muss die Summe aus dem Anteil der pro Zeit- und Flächeneinheit in das Gebiet III transmittierten Teilchen und dem Anteil der pro Zeit- und Flächeneinheit in das Gebiet I (zurück)reflektierten Teilchen Eins ergeben. Der Anteil der reflektierten Teilchen ist gleich dem **Reflektionskoeffizienten**  $R$ . Es muss also  $T + R = 1$  gelten. Wie aber berechnen wir  $T$  und  $R$ ?

Bei Einteilchensystemen ist das Betragsquadrat der Lösungsfunktionen  $\Psi$  der SGL, also die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\Psi^*\Psi$ , gleich der Teilchenzahldichte des *einen* Teilchens, sodass das Integral der Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. Teilchenzahldichte über den gesamten Raum gleich Eins ist. Im Fall eines Vielteilchensystems aus voneinander unabhängigen Teilchen verhalten sich folglich die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\Psi^*\Psi$  und die Teilchenzahldichte proportional zueinander. Wenn uns unter diesen Voraussetzungen aber nur Anteile (Verhältnisse) interessieren, ist die tatsächliche Teilchenanzahl nicht von Bedeutung und wir dürfen bei der Betrachtung unseres Einteilchensystems bleiben.

Allgemein wird die Anzahl der Teilchen, die an einem bestimmten Ort (Raumpunkt) pro Zeiteinheit durch eine Flächeneinheit strömt, beschrieben durch eine vektorielle Größe, die Teilchenstromdichte  $\vec{j}(\vec{r}, t)$ . Sie ist das Produkt aus der (skalaren) Teilchendichte  $\rho(\vec{r})$  und der (vektoriellen) Teilchengeschwindigkeit  $\vec{v}(\vec{r}, t)$  an diesem Ort, also von  $\vec{j}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}) \cdot \vec{v}(\vec{r}, t)$ . Hierbei haben wir die Teilchendichte als zeitlich konstant (stationär) angenommen. Weil unser Einteilchenmodell nur eindimensional ist, können wir aber im Folgenden auf die vektorielle Darstellung verzichten.

Wie bereits erläutert, entspricht die Wahrscheinlichkeitsdichte  $\Psi^*\Psi$  der Teilchendichte  $\rho$  und die Teilchengeschwindigkeit  $v_g = \frac{\hbar k}{m}$  im Gebiet I ist gleich der Teilchengeschwindigkeit im Gebiet III. Der Transmissionskoeffizient ist somit

$$T = \frac{\text{Teilchenstromdichte der transmittierten Welle}}{\text{Teilchenstromdichte der einfallenden Welle}} = \frac{|F e^{ikx}|^2 \cdot v_g}{|A e^{ikx}|^2 \cdot v_g} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

und der Reflektionskoeffizient

$$R = \frac{\text{Teilchenstromdichte der reflektierten Welle}}{\text{Teilchenstromdichte der einfallenden Welle}} = \frac{|B e^{-ikx}|^2 \cdot v_g}{|A e^{ikx}|^2 \cdot v_g} = \frac{|B|^2}{|A|^2} .$$

Beim Einsetzen von  $A$  und  $B$  kürzt sich  $F$  heraus und mit

$$\varepsilon^2 = \frac{\kappa^4 + k^4}{\kappa^2 k^2} - \frac{2 \kappa^2 k^2}{\kappa^2 k^2}, \quad \eta^2 = \frac{\kappa^4 + k^4}{\kappa^2 k^2} + \frac{2 \kappa^2 k^2}{\kappa^2 k^2} \Rightarrow \eta^2 = 4 + \varepsilon^2$$

sowie der Potentialbarrierenbreite  $2a = d$  resultiert

$$T = \frac{1}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{\varepsilon^2}{4}\right) \sinh^2(2\kappa a)} = \frac{1}{1 + \frac{4 + \varepsilon^2}{4} \sinh^2(2\kappa a)},$$

$$T = \frac{1}{1 + \frac{\eta^2}{4} \sinh^2(\kappa d)}, \quad R = \frac{\frac{\eta^2}{4} \sinh^2(\kappa d)}{1 + \frac{\eta^2}{4} \sinh^2(\kappa d)}, \quad \eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}. \quad (6.3)$$

Wie man sofort sieht, gilt tatsächlich  $T + R = 1$ .

Bevor wir den Transmissionskoeffizienten  $T$  aus (6.3) interpretieren, schreiben wir ihn unter Verwendung von

$$\frac{\eta^2}{4} = \frac{1}{4} \left( \frac{\kappa^2 + k^2}{k \cdot \kappa} \right)^2 = \frac{1}{4} \left( \frac{2m(V - E)/\hbar^2 + 2mE/\hbar^2}{\sqrt{2m(V - E)} \cdot \sqrt{2mE/\hbar^2}} \right)^2 = \frac{V^2}{4 E(V - E)}$$

und mit  $\sinh^2(\kappa d) = \left( \frac{e^{\kappa d} - e^{-\kappa d}}{2} \right)^2 = \frac{(e^{\kappa d} - e^{-\kappa d})^2}{4}$  um:

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V^2}{16 E(V - E)} \cdot (e^{\kappa d} - e^{-\kappa d})^2}. \quad (6.4)$$

Im Fall einer breiten und gemäß  $V \gg E$  hohen Potentialbarriere gilt

$$\kappa d \gg 1 \Rightarrow \begin{cases} e^{\kappa d} \gg 1 \\ e^{-\kappa d} \approx 0 \end{cases},$$

sodass wir in (6.4) den Summanden 1 im Nenner und die Exponentialfunktion  $e^{-\kappa d}$  vernachlässigen können. Wir erhalten schließlich die Näherung

$$T \approx \frac{16 E(V - E)}{V^2} \cdot e^{-2\kappa d}, \quad (6.5)$$

$$T \approx \frac{16 E(V - E)}{V^2} \cdot e^{-d\sqrt{8m(V-E)}/\hbar}, \quad \kappa d \gg 1. \quad (6.6)$$

Im Vergleich zum Term

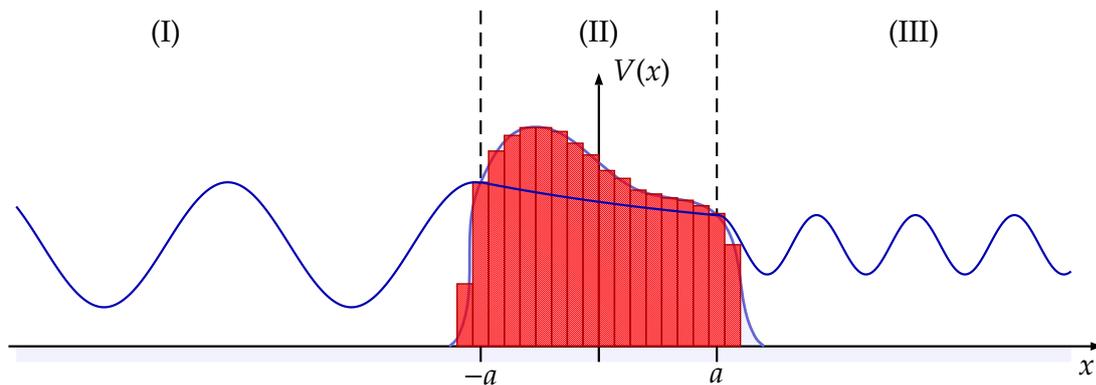
$$\frac{16 E(V - E)}{V^2} = \exp \left\{ \ln [16 E(V - E) / V^2] \right\}$$

ist der Exponentialterm

$$\exp \left\{ -d \sqrt{8m(V - E) / \hbar} \right\}$$

meistens der dominante, sodass dann die Teilchenstromdichte hinter der Potentialbarriere näherungsweise exponentiell abfällt mit der Breite  $d$  der Barriere und mit der Wurzel aus der effektiven Höhe  $V - E$  der Barriere. Obwohl die Teilchen klassisch betrachtet die Potentialbarriere nicht überwinden können, „tunneln“ sie quantenmechanisch betrachtet mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit durch sie hindurch. Man bezeichnet deshalb dieses rein quantenmechanische Phänomen als Tunneleffekt.

Unser Modell einer exakt-rechteckigen Potentialbarriere ist zur Vereinfachung idealisiert und nicht realisierbar. Tatsächlich sind die Verhältnisse komplizierter und entsprechen ungefähr denen in Abbildung 6.4.



**Abb. 6.4** Der im Gebiet II angenäherte Potentialverlauf  $V(x)$  beschreibt einen Realisierungsversuch der rechteckigen Potentialbarriere. Wie man sieht, hat die Kurve  $V(x)$  weder einen Knick noch eine Stufe. **Anmerkung:**  $\text{Re}\{\Psi(x)\}$  sollte im Gebiet III die gleiche Periode besitzen wie im Gebiet I, weil für die Wellenzahlen dort  $k(\text{III}) = k(\text{I})$  gilt.

Quelle: [http : //www.semibyte.de/wp/download/graphicslib/physics/tunneleffekt\\_wellenfunktion\\_und\\_potential\\_2.png](http://www.semibyte.de/wp/download/graphicslib/physics/tunneleffekt_wellenfunktion_und_potential_2.png)

## 6.2 Raster-Tunnel-Mikroskopie

Die Raster-Tunnel-Mikroskopie (RTM) ist ein einfaches Beispiel dafür, wie sich der Tunneleffekt in der Praxis nutzen lässt. Die Idee dabei ist, die Oberfläche eines mikroskopisch kleinen Objekts zu erfassen und wie eine physische Landkarte darzustellen, indem verschiedenen „Höhen“ innerhalb der Objektoberfläche entsprechende Farben oder Grauwerte zugeordnet werden. Die „Höhen“ sind auf der atomaren Skala nicht allein topographischer sondern auf Grund verschiedener Elektronen-Zustandsdichten<sup>2</sup> auch elektronischer Natur. Als Objekte bzw. Proben eignen sich elektrische Leiter (z. B. Metalle, Graphit) und mit Einschränkungen auch einige Halbleiter.

Die RTM ist also ein Verfahren zur (realen) dreidimensionalen Abbildung elektrisch leitfähiger Oberflächen im Ortsraum bis hinab in die atomare Größenordnung, d. h. bis zu etwa  $0,01 \text{ \AA}$  vertikal und  $1 \text{ \AA}$  lateral.<sup>3</sup>

Das Prinzip der RTM ist recht einfach: Zwischen der Probenoberfläche (Metall P) und der Sondenspitze (Metall S, meistens Gold, Platin-Iridium oder Wolfram) befindet sich ein nichtleitender Spalt (Vakuum oder abhängig vom Probenmaterial auch Luft) der Breite  $d$ . Der Spalt entspricht der Potentialbarriere (Abbildung 6.5).

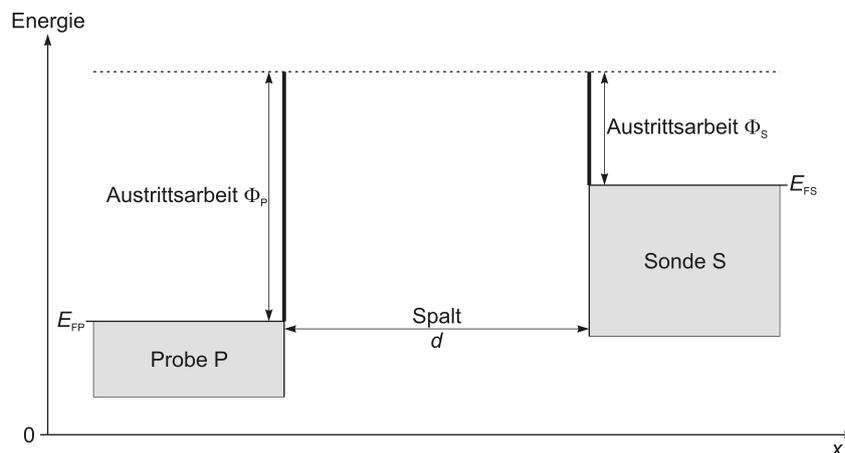


Abb. 6.5

Elektronen sind Fermionen. Die Elektronen in den Leitungsbändern von Metallen kann man als freie Quantenobjekte betrachten. Sie bilden dort ein sog. Fermi-Gas. Die Energie der Elektronen im höchsten besetzten Energieniveau des Leitungsbandes wird durch ihre Fermi-Energie<sup>4</sup>  $E_F$  charakterisiert. Um diese Elektronen vom Metall in den Spalt zu befördern, ist die sog. Austrittsarbeit  $\Phi$  erforderlich. Bestehen Probe und Sonde aus unterschiedlichem Material, so besitzen sie allgemein weder die gleiche Fermi-Energie noch die gleiche Austrittsarbeit.

Werden Probe und Sonde bis auf wenige Ångström angenähert, so tunneln die Elektronen von einer Elektrode zur anderen, bis sich ein Gleichgewicht zwischen ihren Fermi-Niveaus eingestellt hat. Das Niveau der Fermi-Energie  $E_{FP}$  der Probe liegt dann auf gleicher Höhe wie das Niveau der Fermi-Energie  $E_{FS}$  der Sonde und wir können das Niveau  $E_{FP} = E_{FS}$  als Energie-Nullniveau festlegen (Abbildung 6.6).

<sup>2</sup>Die Elektronen-Zustandsdichte ist die Anzahl verschiedener Quantenzustände der Elektronen pro Energieintervall.

<sup>3</sup> $1 \text{ \AA} = \frac{1}{10} \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$ .

<sup>4</sup>Die Fermi-Energie  $E_F$  ist die Energie des höchsten besetzten Zustands eines Fermionensystems bei  $T = 0$  unter Berücksichtigung des Pauli-Ausschlussprinzips.

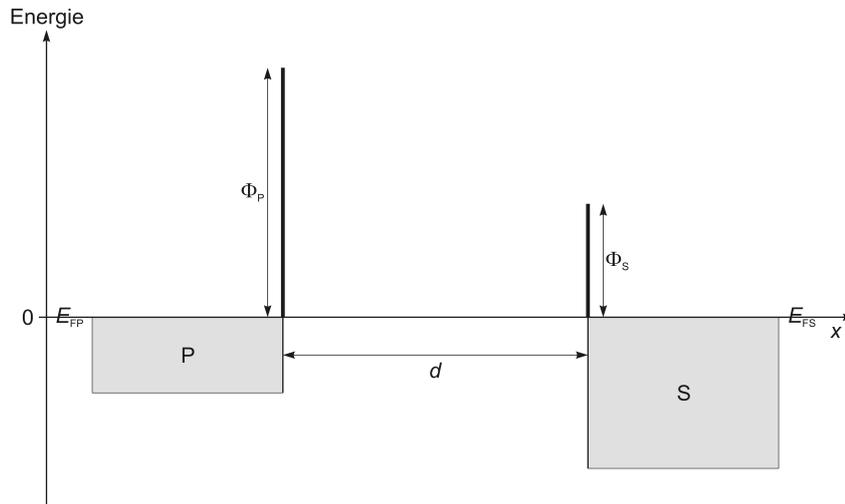


Abb. 6.6

Um einen kontinuierlichen Tunnелеlektronenfluss bzw. Tunnelstrom zu erzeugen, wird zwischen Probe und Sonde eine kleine elektrische Spannung, die Tunnelspannung  $U_T$  angelegt (Abbildung 6.7).<sup>5</sup> Dies hat zur Folge, dass einerseits das Fermi-Niveau der Probe um  $e \cdot U_T$  gegenüber der Sonde angehoben wird und andererseits die Gesamtenergie  $E$  jedes Elektrons um den Betrag  $e \cdot U_T$  auf den Wert  $E_e$  zunimmt. Während aber die Gesamtenergie

$$E_e = E + eU_T$$

der Elektronen im Spalt erhalten bleibt, fällt die Potentialerhöhung  $eU_T$  von der Probe bis zur Sonde linear auf Null ab. Die durch die angelegte Tunnelspannung hervorgerufene Potentialerhöhung über dem Spalt beträgt also im Mittel nur  $eU_T/2$ .

Um die Verhältnisse bei der RTM an unser Modell der rechteckigen Potentialbarriere anzupassen, mitteln wir auch die Austrittsarbeit von Probe und Sonde gemäß

$$\frac{\Phi_P + \Phi_S}{2} = \bar{\Phi}$$

und addieren diesen Mittelwert mit dem Mittelwert der Potentialerhöhung, die aus der Tunnelspannung hervorgeht.

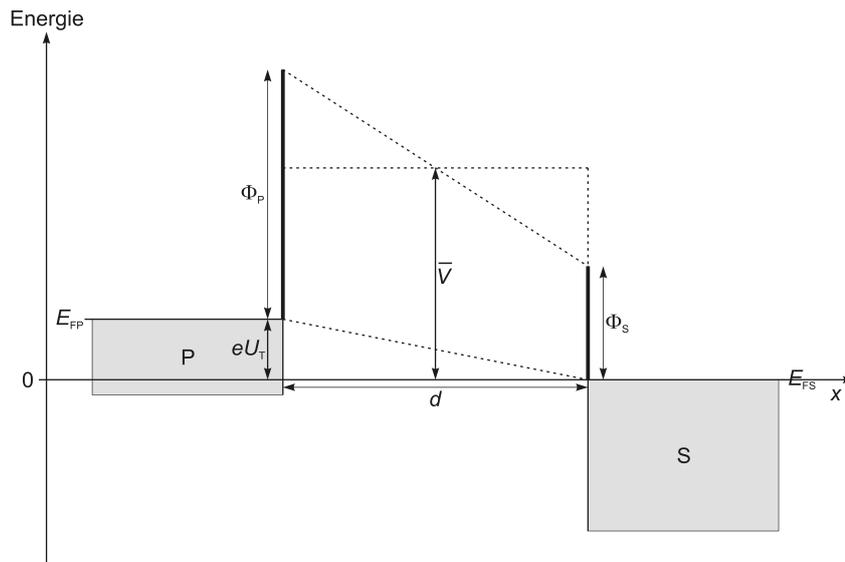


Abb. 6.7

<sup>5</sup>Die verwendeten Tunnelspannungen liegen etwa zwischen 10 mV und 500 mV, weil die Elektronen nur zwischen Zuständen nahe des Fermi-Niveaus tunneln. Bei höheren Spannungen und den daraus resultierenden höheren elektrischen Feldstärken kommt es zur sog. Feldemission von Elektronen aus der Probe, die primär von der Feldstruktur, also von der Sondenform, und nicht von der Probenoberfläche abhängt.

So erhalten wir das in der Abbildung 6.8 dargestellte und für die RTM angepasste bzw. vereinfachte Barrierenpotential in Form des Rechteckpotentials

$$\bar{V} = \frac{(\Phi_P + eU_T) + \Phi_S}{2} = \bar{\Phi} + \frac{eU_T}{2} .$$

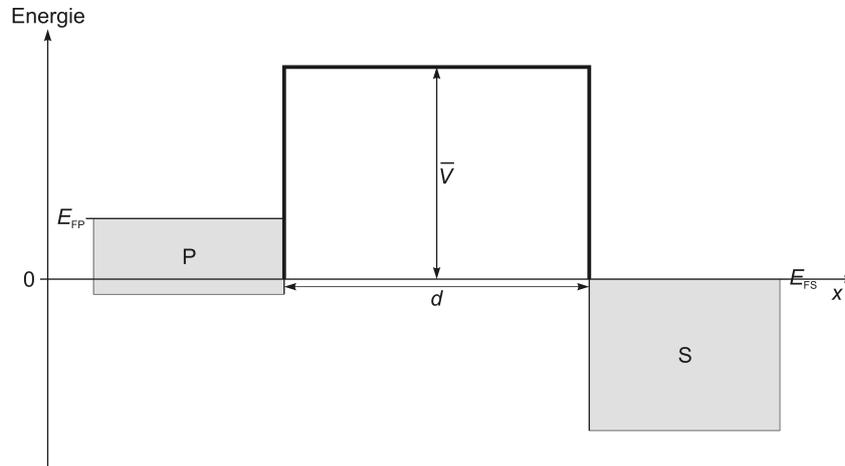


Abb. 6.8

Ausgehend von (6.5) und (6.6) und mit  $\bar{V} - E_e$  statt  $V - E$  sowie der Elektronenmasse  $m_e$  gilt folglich für den Tunnelstrom bei der RTM näherungsweise

$$I_T \propto e^{-2\kappa \cdot d} = e^{-d \cdot \sqrt{8m_e(\bar{V} - E_e)}/\hbar}$$

und mit

$$\bar{V} - E_e = \bar{\Phi} + \frac{eU_T}{2} - (E + eU_T) = \bar{\Phi} - E - \frac{eU_T}{2}$$

schließlich

$$I_T \propto e^{-d \cdot \sqrt{8m_e(\bar{\Phi} - E - eU_T/2)}/\hbar}$$

bzw.

$$I_T \propto e^{-d \cdot \sqrt{\alpha - \beta U_T}} .$$

**Wir stellen fest:**

Der Tunnelstrom  $I_T$  wächst mit der Tunnelspannung  $U_T$  und fällt mit der Spaltbreite  $d$  exponentiell ab.

Auf die Konstruktion und Funktionsweise des Raster-Tunnel-Mikroskops wollen wir nicht weiter eingehen. Dazu findet man im Internet mehr als genug gute Informationen. Um keine falschen Vorstellungen aufkommen zu lassen, wollen wir aber darauf hinweisen, dass die Sondenführung zur Rasterung mit einem Piezo-Kristall, z. B. einem Piezo-Röhrchen oder einem Piezo-Tripod, erfolgt, an dem die Sonde befestigt ist. Durch entsprechend angelegte und computergesteuerte elektrische Spannungen lässt sich die Sonde dann in allen drei Raumrichtungen mit extrem hoher Genauigkeit hin- und herbewegen. Aus den Messwerten jedes Rasterpunkts wird dann das Oberflächenbild der Probe generiert.

Je nach Probenmaterial und wissenschaftlicher Fragestellung gibt es im Wesentlichen zwei Messmethoden:

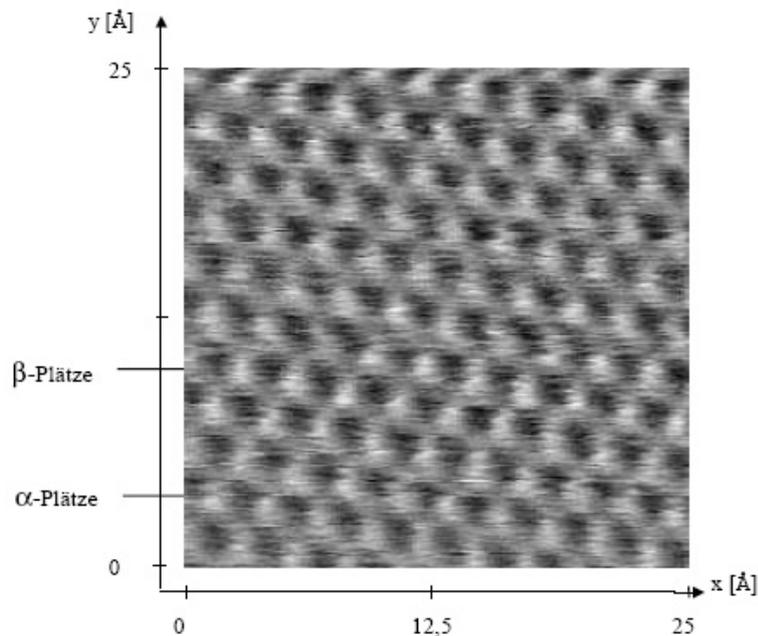
- Modus konstanter Rasterhöhe:

Liegt die Probenoberfläche in der  $x, y$ -Ebene, dann wird die Höhe  $z$  der SONDENSPIITZE über der  $x, y$ -Ebene konstant gehalten. Das Oberflächenbild wird aus den gemessenen Tunnelströmen erstellt. Wegen der Kollisionsgefahr zwischen Probenoberfläche und SONDENSPIITZE eignet sich dieser Modus nur für nahezu atomar flache Probenoberflächen.

- Modus konstanten Tunnelstroms:

Die SONDENSPIITZE wird so über die Probenoberfläche geführt, dass dabei der Tunnelstrom konstant bleibt. Die Spitze folgt also den topographischen und elektronischen Oberflächenschwankungen. Das Oberflächenbild wird aus den Steuerspannungen für den Piezo-Kristall generiert. Dieser Modus ist zeitaufwendiger.

Die Abbildung 6.9 soll uns zum Abschluss einen Eindruck vom Auflösungsvermögen der RTM vermitteln.



**Abb. 6.9** Rastertunnelmikroskopisches Abbild einer Graphit-Kristallebene. Die in Dreiecken angeordneten hellen Stellen entsprechen den C-Atomen an den  $\beta$ -Plätzen.

## 7 Anhang

Lösungsweg für das Integral (4.9) 
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\left[\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + ikx\right]}$$

Mit der quadratischen Ergänzung  $\varepsilon^2$  formen wir den Exponenten so um, dass die Variable  $x$  am Ende nur in einem Summanden steht:

$$\begin{aligned} & - \left[ \frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2} + ikx \right] \\ = & - \left[ \frac{x^2 - 2xx_0 + x_0^2 + 4\sigma^2 ikx}{4\sigma^2} \right] = - \left[ \frac{x^2 + x i4\sigma^2 k - x 2x_0 + x_0^2}{4\sigma^2} \right] \\ = & - \left[ \frac{x^2}{4\sigma^2} + \frac{x(i2\sigma^2 k - x_0)}{2\sigma^2} + \varepsilon^2 - \varepsilon^2 + \frac{x_0^2}{4\sigma^2} \right], \\ & \varepsilon = \frac{i2\sigma^2 k - x_0}{2\sigma}, \\ = & - \left[ \left( \frac{x}{2\sigma} + \frac{i2\sigma^2 k - x_0}{2\sigma} \right)^2 - \left( \frac{i2\sigma^2 k - x_0}{2\sigma} \right)^2 + \frac{x_0^2}{4\sigma^2} \right] \\ = & - \left[ \left( \frac{x}{2\sigma} + \frac{i2\sigma^2 k - x_0}{2\sigma} \right)^2 - \left( -\frac{4\sigma^4 k^2}{4\sigma^2} - \frac{4\sigma^2 ikx_0}{4\sigma^2} + \frac{x_0^2}{4\sigma^2} \right) + \frac{x_0^2}{4\sigma^2} \right] \\ = & - \left( \frac{x}{2\sigma} + \frac{i2\sigma^2 k - x_0}{2\sigma} \right)^2 - \sigma^2 k^2 - ikx_0. \end{aligned}$$

Das Integral lautet damit:

$$\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\left(\frac{x}{2\sigma} + \frac{i2\sigma^2 k - x_0}{2\sigma}\right)^2} \cdot e^{-\sigma^2 k^2} \cdot e^{-ikx_0}.$$

Durch die Substitution  $y = \frac{x}{2\sigma} + \frac{i2\sigma^2 k - x_0}{2\sigma}$  und mit  $dx = 2\sigma dy$  sowie  $\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} = \sqrt{\pi}$  erhalten wir

$$\frac{2\sigma\sqrt{\pi}}{(2\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}}} e^{-\sigma^2 k^2} \cdot e^{-ikx_0} = (8\pi\sigma^2)^{\frac{1}{4}} e^{-\sigma^2 k^2} \cdot e^{-ikx_0}.$$

**Lösungsweg für das Integral (4.13)** 
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

Mit den Substitutionen

$$\frac{x-x_0}{\sqrt{2\sigma^2}} = y \Leftrightarrow x = x_0 + \sqrt{2\sigma^2} y \Rightarrow dx = \sqrt{2\sigma^2} dy$$

lässt sich das Integral wie folgt umschreiben und lösen:

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{2\sigma^2} \cdot (x_0 + \sqrt{2\sigma^2} y) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-y^2} \\ &= \frac{x_0 \sqrt{2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2}}_{=\sqrt{\pi}} + \frac{\sqrt{2\sigma^2} \sqrt{2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy y e^{-y^2}}_{=0} \\ &= x_0 . \end{aligned}$$

**Lösungsweg für das Integral (4.14)** 
$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x^2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

Mit den Substitutionen

$$\frac{x-x_0}{\sqrt{2\sigma^2}} = y, \quad x^2 = x_0^2 + 2x_0\sqrt{2\sigma^2}y + 2\sigma^2 y^2, \quad dx = \sqrt{2\sigma^2} dy$$

lässt sich das Integral wie folgt umschreiben und lösen:

$$\begin{aligned} &= \int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{2\sigma^2} \cdot (x_0^2 + 2x_0\sqrt{2\sigma^2}y + 2\sigma^2 y^2) \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-y^2} \\ &= \frac{x_0^2 \sqrt{2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2}}_{=\sqrt{\pi}} + \frac{2x_0\sqrt{2\sigma^2} \sqrt{2\sigma^2}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy y e^{-y^2}}_{=0} + \frac{\sqrt{2\sigma^2} 2\sigma^2}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy y^2 e^{-y^2}}_{=\frac{1}{2}\sqrt{\pi}} \\ &= x_0^2 + \sigma^2 . \end{aligned}$$

### Statt der Taylor-Entwicklung der Dispersionsrelation (4.16)

$$\begin{aligned} \omega(k) &= \frac{\hbar k^2}{2m} \\ &= \frac{\hbar (k - k_0 + k_0)^2}{2m} = \frac{\hbar [(k - k_0)^2 + 2k_0(k - k_0) + k_0^2]}{2m} \\ &= \underbrace{\frac{\hbar}{2m} (k - k_0)^2}_{\beta} + \underbrace{\frac{\hbar k_0}{m} (k - k_0)}_{v_g} + \underbrace{\frac{\hbar k_0^2}{2m}}_{\omega_0} \\ \omega(k) &= \beta (k - k_0)^2 + v_g (k - k_0) + \omega_0 . \end{aligned}$$

## Lösungsweg für das Integral (4.17)

$$\frac{K}{2\pi} \int dk e^{-\sigma^2(k-k_0)^2} \cdot e^{ikx} \cdot e^{-i[\omega_0 + v_g(k-k_0) + \beta(k-k_0)^2]t}$$

Zunächst formen wir den Exponenten um und benutzen dann wieder die quadratische Ergänzung  $\varepsilon^2$ :

$$\begin{aligned} &= \frac{K}{2\pi} \int dk e^{-\sigma^2(k-k_0)^2} \cdot e^{i(k-k_0)x} \cdot e^{ik_0x} \cdot e^{-i\omega_0 t} \cdot e^{-i[v_g(k-k_0) + \beta(k-k_0)^2]t} \\ &= \frac{K}{2\pi} e^{i(k_0x - \omega_0 t)} \int dk \exp \left\{ -\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right)(k-k_0)^2 + i(x-v_g t)(k-k_0) \right\} \\ &= \frac{K}{2\pi} e^{i(k_0x - \omega_0 t)} \int dk \exp \left\{ -\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right) \left[ (k-k_0)^2 - \frac{i(x-v_g t)}{\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}(k-k_0) + \varepsilon^2 - \varepsilon^2 \right] \right\}, \\ &\hspace{15em} \varepsilon = \frac{i(x-v_g t)}{2\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right)}, \\ &= \frac{K}{2\pi} e^{i(k_0x - \omega_0 t)} \int dk \exp \left\{ -\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right) \left[ (k-k_0)^2 - \frac{i(x-v_g t)}{\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}(k-k_0) \right. \right. \\ &\hspace{15em} \left. \left. + \left(\frac{i(x-v_g t)}{2\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right)}\right)^2 - \left(\frac{i(x-v_g t)}{2\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right)}\right)^2 \right] \right\} \\ &= \frac{K}{2\pi} e^{i(k_0x - \omega_0 t)} \cdot e^{-\frac{(x-v_g t)^2}{4\left[\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right]}} \int dk \exp \left\{ -\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right) \left( (k-k_0) - \frac{i(x-v_g t)}{2\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right)} \right)^2 \right\}. \end{aligned}$$

Mit  $\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m} = a$ , mit  $(k-k_0) - \frac{i(x-v_g t)}{2\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right)} = y$  sowie mit  $dk = dy$  und  $\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-ay^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$  erhalten wir schließlich

$$\begin{aligned} &= \frac{K}{2\pi} e^{i(k_0x - \omega_0 t)} \cdot e^{-\frac{(x-v_g t)^2}{4\left[\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right]}} \int dy e^{-ay^2} \\ &= \frac{K}{2\pi} e^{i(k_0x - \omega_0 t)} \cdot e^{-\frac{(x-v_g t)^2}{4\left[\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right]}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{a}} \\ &= \frac{K}{2\pi} e^{i(k_0x - \omega_0 t)} \cdot e^{-\frac{(x-v_g t)^2}{4\left[\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}\right]}} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}} \\ &= \frac{K}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\exp\left\{i(k_0x - \omega_0 t)\right\}}{\sqrt{\sigma^2 + \frac{i\hbar}{2m}t}} \cdot \exp\left\{-\frac{(x-v_g t)^2}{4\left(\sigma^2 + \frac{i\hbar}{2m}t\right)}\right\} \\ &= \frac{K}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\exp\left\{i(k_0x - \omega_0 t)\right\}}{\sqrt{\sigma^2 + i\beta t}} \cdot \exp\left\{-\frac{(x-v_g t)^2}{4(\sigma^2 + i\beta t)}\right\}. \end{aligned}$$

### Lösungsweg für das Integral (4.21)

$$\int dx \cdot x \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{\sigma^2(x - v_g t)^2}{2(\sigma^4 + \beta^2 t^2)} \right\}$$

Mit den Substitutionen

$$\begin{aligned} \sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2} &= a, \\ \frac{\sigma(x - v_g t)}{\sqrt{2} \sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2}} &= \frac{\sigma(x - v_g t)}{a \sqrt{2}} = y \quad \Leftrightarrow \quad x = \frac{a \sqrt{2}}{\sigma} y + v_g t, \\ dx &= \frac{a \sqrt{2}}{\sigma} dy \end{aligned}$$

lässt sich das Integral wie folgt umschreiben und lösen:

$$\begin{aligned} &= \int dy \frac{a \sqrt{2}}{\sigma} \cdot \left( \frac{a \sqrt{2}}{\sigma} y + v_g t \right) \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{a} \cdot e^{-y^2} \\ &= \frac{a \sqrt{2}}{\sigma \sqrt{\pi}} \underbrace{\int dy y e^{-y^2}}_{=0} + \frac{v_g t}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int dy e^{-y^2}}_{=\sqrt{\pi}} \\ &= v_g t. \end{aligned}$$

### Lösungsweg für das Integral (4.22)

$$\int dx \cdot x^2 \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\sigma^4 + \beta^2 t^2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{\sigma^2(x - v_g t)^2}{2(\sigma^4 + \beta^2 t^2)} \right\}$$

Mit den gleichen Substitutionen wie für die Lösung des Integrals (4.21) lässt sich das Integral (4.22) wie folgt umschreiben und lösen:

$$\begin{aligned} &= \int dy \frac{a \sqrt{2}}{\sigma} \cdot \left( \frac{a \sqrt{2}}{\sigma} y + v_g t \right)^2 \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{a} \cdot e^{-y^2} \\ &= \int dy \frac{a \sqrt{2}}{\sigma} \cdot \left( \frac{2a^2}{\sigma^2} y^2 + 2 \frac{a \sqrt{2}}{\sigma} y v_g t + v_g^2 t^2 \right) \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{a} \cdot e^{-y^2} \\ &= \frac{2a^2}{\sigma^2 \sqrt{\pi}} \underbrace{\int dy y^2 e^{-y^2}}_{=\frac{1}{2} \sqrt{\pi}} + \frac{2\sqrt{2} a v_g t}{\sigma \sqrt{\pi}} \underbrace{\int dy y e^{-y^2}}_{=0} + \frac{v_g^2 t^2}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int dy e^{-y^2}}_{=\sqrt{\pi}} \\ &= \frac{a^2}{\sigma^2} + v_g^2 t^2 \\ &= \frac{\sigma^4 + \beta^2 t^2}{\sigma^2} + v_g^2 t^2. \end{aligned}$$

**Lösungsweg für das Integral (4.23)**  $\int dk \cdot k \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} e^{-2\sigma^2(k-k_0)^2}$

Mit den Substitutionen

$$\begin{aligned}\sqrt{2}\sigma(k-k_0) = y &\Leftrightarrow k = \frac{1}{\sigma\sqrt{2}}y + k_0, \\ dk &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2}}dy\end{aligned}$$

lässt sich das Integral wie folgt umschreiben und lösen:

$$\begin{aligned}&= \int dy \frac{1}{\sigma\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{1}{\sigma\sqrt{2}}y + k_0\right) \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} \cdot e^{-y^2} \\ &= \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \underbrace{\int dy y e^{-y^2}}_{=0} + \frac{k_0}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int dy e^{-y^2}}_{=\sqrt{\pi}} \\ &= k_0.\end{aligned}$$

**Lösungsweg für das Integral (4.24)**  $\int dk \cdot k^2 \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} e^{-2\sigma^2(k-k_0)^2}$

Mit den gleichen Substitutionen wie für die Lösung des Integrals (4.23) lässt sich das Integral (4.24) wie folgt umschreiben und lösen:

$$\begin{aligned}&= \int dy \frac{1}{\sigma\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{1}{\sigma\sqrt{2}}y + k_0\right)^2 \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} \cdot e^{-y^2} \\ &= \int dy \frac{1}{\sigma\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{1}{2\sigma^2}y^2 + \frac{2k_0}{\sigma\sqrt{2}}y + k_0^2\right) \cdot \sqrt{\frac{2\sigma^2}{\pi}} \cdot e^{-y^2} \\ &= \frac{1}{2\sigma^2\sqrt{\pi}} \underbrace{\int dy y^2 e^{-y^2}}_{=\frac{1}{2}\sqrt{\pi}} + \frac{2k_0}{\sigma\sqrt{2\pi}} \underbrace{\int dy y e^{-y^2}}_{=0} + \frac{k_0^2}{\sqrt{\pi}} \underbrace{\int dy e^{-y^2}}_{=\sqrt{\pi}} \\ &= \frac{1}{4\sigma^2} + k_0^2.\end{aligned}$$

## Die Dispersionsrelation in den Lösungen der stationären SGL

Die Fourier-Rücktransformation

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \int d\omega \Phi(k, \omega) e^{i(kx - \omega t)} \quad (7.1)$$

beschreibt allgemein die Superposition von „ $k$ -Raum-Lösungen“ der SGL zur „Lösungssumme“  $\Psi(x, t)$ . Die Amplitudenfunktion  $\Phi(k, \omega)$  bildet dabei das kontinuierliche Amplitudenspektrum dieser  $k$ -Raum-Lösungen. Setzen wir also (7.1) in die zeitabhängige SGL für ein freies Teilchen ( $V \equiv 0$ ) ein:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \\ \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \int d\omega \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Phi(k, \omega) e^{i(kx - \omega t)} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \int d\omega i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(k, \omega) e^{i(kx - \omega t)} \\ \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \int d\omega \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \Phi(k, \omega) e^{i(kx - \omega t)} &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \int d\omega \hbar \omega \Phi(k, \omega) e^{i(kx - \omega t)} \\ \Leftrightarrow \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \int d\omega \left( \hbar \omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \Phi(k, \omega) e^{i(kx - \omega t)} &= 0. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Berücksichtigen wir im Integranden von (7.2) die **Materiewellen-Dispersionsrelation**  $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ , so ist die Gleichung erfüllt. Damit die Gleichung aber für alle  $\omega$  erfüllt ist, darf das Integral über  $\omega$  nur an den Stellen  $\omega = \omega(k)$  einen Beitrag liefern und muss sonst verschwinden. Diese Forderung erfüllt die  $\delta$ -Funktion, sodass

$$\Phi(k, \omega) = \tilde{A}(k) 2\pi \delta(\omega - \omega(k)).$$

Damit erhält (7.1) die Form

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk \int d\omega \tilde{A}(k) 2\pi \delta(\omega - \omega(k)) e^{i(kx - \omega t)}$$

und nach Integration über  $\omega$  verbleibt nur noch

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int dk \tilde{A}(k) e^{i(kx - \omega(k)t)}. \quad (7.3)$$

## Fourier-Transformation und Normierung der Wahrscheinlichkeitsamplituden

Die Fourier-Transformation kennzeichnen wir mit  $\mathcal{F}$  und die Fourier-Rücktransformation mit  $\mathcal{F}^{-1}$ . Die in diesem Skript verwendete Notation der Fourier-Transformation (1.1) bis (1.5) ist zwar konsistent mit der Herleitung der Fourier-Transformation, hat aber den Nachteil, dass sie nicht die Norm erhält. Das liegt an der unsymmetrischen Stellung des Vorfaktors  $\frac{1}{2\pi}$ , der in unserer Notation nur bei der Fourier-Rücktransformation auftritt, jedoch nicht bei der Fourier-Hintransformation. Um nach erfolgter Fourier-Hin- bzw. Rücktransformation trotzdem normierte Ergebnisse zu erzielen, mussten wir „nachnormieren“. Dabei konnten wir prinzipiell folgendes feststellen:

$$\begin{aligned} \Psi(x) \text{ normiert} \quad \xrightarrow{\mathcal{F}} \quad \tilde{A}(k) \text{ unnormiert} &\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \tilde{A}(k) = A(k) \text{ normiert}, \\ A(k) \text{ normiert} \quad \xrightarrow{\mathcal{F}^{-1}} \quad \hat{\Psi}(x) \text{ unnormiert} &\longrightarrow \sqrt{2\pi} \cdot \hat{\Psi}(x) = \Psi(x) \text{ normiert}. \end{aligned}$$

Um sich das „Nachnormieren“ zu ersparen, wird in der Physik oft die Notation mit dem symmetrisch auftretenden Vorfaktor  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$  verwendet, wie z. B.:

$$\begin{aligned} \text{Hintransformation:} \quad \Phi(k, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, t) e^{-ikx}, \\ \text{Rücktransformation:} \quad \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \Phi(k, t) e^{ikx}. \end{aligned}$$

Leider ist diese in den Vorfaktoren symmetrische Notation nicht konsistent mit der Herleitung der Fourier-Transformation.