

Theoretische Physik II, Quantenmechanik I, Bachelor-Physik, SS 17

1. Schrödinger'sche Wellenmechanik

1.1 Einführung

Die Quantenmechanik (QM) stützt sich auf ein widerspruchsfreies abstraktes Denkgebäude, das aus der Sicht der klassischen Physik wenig intuitiv ist. Aus diesem Grunde gilt sie als konzeptionell schwierig; eine "quantenmechanische Intuition" wird sich erst im Zuge der intensiven Auseinandersetzung mit quantenmechanischen Problemen entwickeln.

Wir müssen uns vor allem deshalb mit der QM beschäftigen, weil einige experimentelle Befunde (nicht nur aus dem atomaren Bereich) klassisch nicht erklärt werden können (vgl. Vorlesungen Experimentalphysik):

- Liniencharakter atomarer und molekularer Absorptions- oder Emissionsspektren

Die *scharfen* Spektrallinien des von Atomen absorbierten oder emittierten Lichts waren ein starkes Argument zugunsten der Annahme, dass Elektronen in Atomen charakteristische *diskrete* Energien besitzen. Ritz fand bereits 1908, dass "durch additive und subtraktive Kombination bekannter Spektrallinien neue Spektrallinien gefunden werden können" → Ritz'sches Kombinationsprinzip.

$$\hbar \omega_{\ell n} = E_{\ell} - E_n = E_{\ell} - E_m + E_m - E_n = \hbar(\omega_{\ell m} + \omega_{mn}), \quad \underline{\omega_{\ell n} = \omega_{\ell m} + \omega_{mn}} .$$

Spektralserien, die aus Linien entsprechend Übergängen aus verschiedenen höheren Energiezuständen in einen gemeinsamen Grundzustand bestehen, konnten sehr genau vermessen werden (Balmer-Serie im Wasserstoffatom, z.B.).

Weitere Beispiele:

- Photo- und Compton-Effekt
- Beugung von Kathodenstrahlen
- Supraleitung, Superfluidität
- Spektrale Energieverteilung der Wärmestrahlung
- Tunneleffekt ■ ...
- YouTube: Dr. Quantum - The infamous double slit experiment → [Let's go quantum!](#)

1.1 Experimentelle Grundlagen.

Lichtteilchen und Materiewellen. Welle-Teilchen-Dualismus

Eine *Welle* ist ein aus der Experimentalphysik/Elektrodynamik vertrautes, *nicht lokalisiertes* Objekt, dass durch Wellenvektor \underline{k} und Kreisfrequenz ω charakterisiert wird.

■ ebene Welle in x-Richtung: $u(x, t) = u_0 e^{i(kx - \omega t)}$.

Wellen zeigen Interferenz, Beugung, usw.

Teilchen sind *lokalisierte* Objekte mit Energie E und Impuls \underline{p} , sowie u.U. mit Ruhemasse m_0 , Ladung q , Spin s , usw.

A: Licht: Welle oder Teilchenstrom

Mit der Deutung des Lichts als elektromagnetische Welle im Rahmen der Maxwell'schen Gleichungen schien sich die Wellennatur des Lichts durchgesetzt zu haben.

Anfang des 20. Jahrhunderts mehrten sich Hinweise, das Licht auch Teilchencharakter besitzen kann.

• Hohlraumstrahlung schwarzer Körper (Max Planck, 1900):

Auf der Grundlage der Hypothese, die Energie des elektromagnetischen Feldes sei in Einheiten von $\Delta E = \hbar \omega$ portioniert (\rightarrow gequantelt), leitet Planck eine Formel für die seit langem gesuchte Frequenzverteilung $u(\omega; T)$ der Hohlraumstrahlung ab

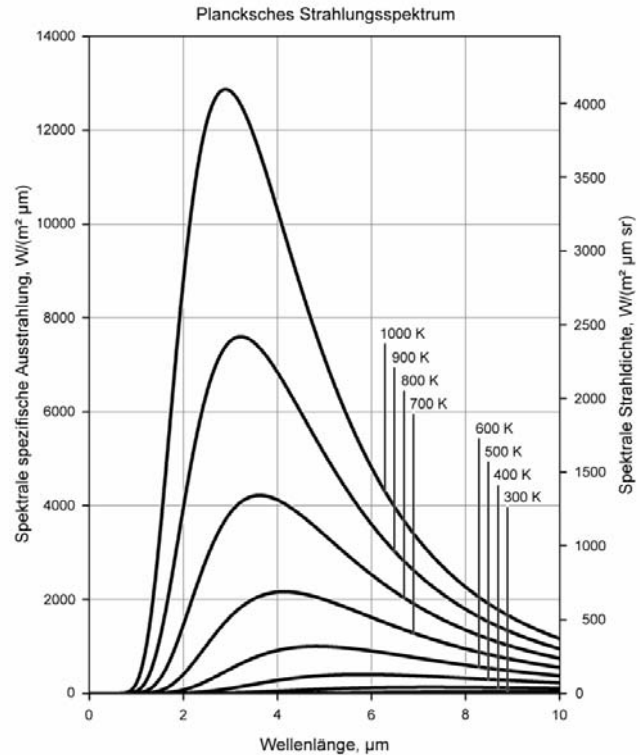
$$u(\omega; T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar \omega}{k_B T}} - 1}$$

Planck'sche Strahlungsformel

Hier bezeichnet c die Lichtgeschwindigkeit, T die Temperatur des schwarzen Strahlers und k_B die Boltzmann-Konstante. Die Konstante \hbar ergibt sich durch Vergleich mit dem Experiment zu

$$\hbar := \frac{h}{2\pi} \cong 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ Nms}$$

→ Planck'sches Wirkungsquantum



Geburtsstunde der Quantenphysik

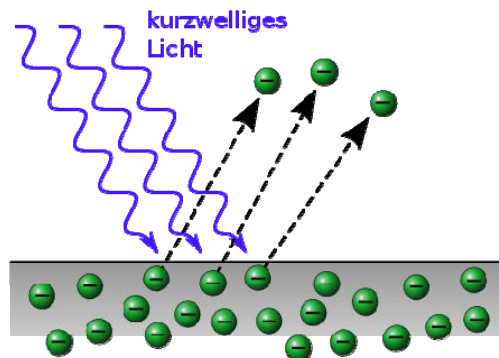
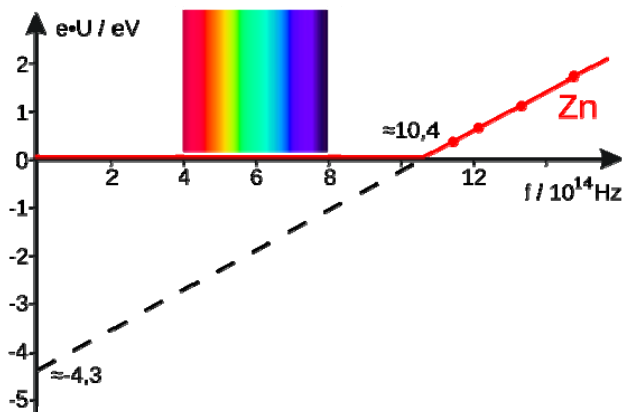
Die Planck'sche Strahlungsformel enthält die bereits vorher experimentell bestätigten Grenzfälle für niedrige ($u \sim \omega^2 \rightarrow$ Rayleigh-Jeans) und hohe Frequenzen ω , das Wien'sche Verschiebungsgesetz (je höher die Temperatur, desto kürzer die Wellenlänge am Intensitätsmaximum: $\hbar \omega_{\max} = 2,82 k_B T$) und auch das Stefan-Boltzmann'sche Gesetz

(Gesamtenergie der Strahlung $U := \int_0^{\infty} d\omega u(\omega, T) \sim T^4$). Bis auf die Spektralverteilung können

alle diese Gesetze thermodynamisch abgeleitet werden!

- Photoeffekt

1887 findet Heinrich Hertz bei Bestrahlung der Kathode einer Röntgenröhre mit ultravioletterem Licht, dass Elektronen nur für $\omega > \omega_{\text{er}}$ emittiert werden → langwellige (rote) Grenze.



Aus der Sicht der Elektrodynamik, also der Vorstellung von Licht als elektromagnetische Welle (\rightarrow Interferenz), ist dieser Befund unverständlich, da die Energie der Welle klassisch nur von der (Amplitude)², nicht aber von der Frequenz abhängt.

Interpretation des Ergebnisses durch Albert Einstein (1905): Das einfallende Licht kommt in kleinen Portionen mit der Energie $E = h \cdot f$ (Photonenhypothese, 1905). Die Energiebilanz in der Form

$$\underbrace{\frac{m_e}{2} v^2}_{\text{kinetische Energie des nichtrelativistischen } e^- \text{ (die Messgröße)}} = \underbrace{h \cdot f}_{\text{Energie des absorbierten Photons}} - \underbrace{W_A}_{\text{Austrittsarbeit (materialabhängig)}}$$

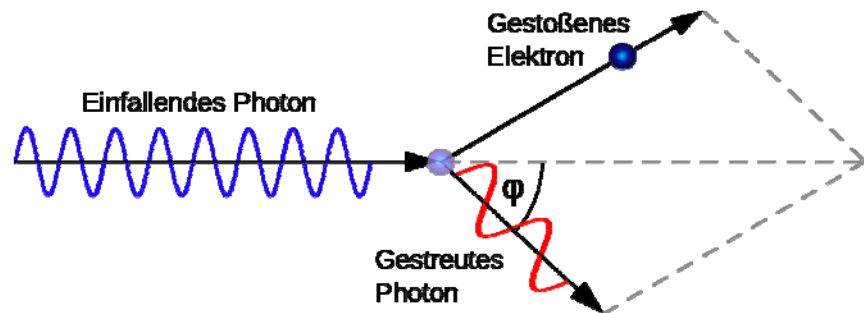
geschrieben, erklärt die Existenz der "roten Grenze" f_{cr} und den linearen Zusammenhang zwischen der kinetischen Energie der aus der Metalloberfläche herausgeschlagenen Ladungsträger und der Energie der absorbierten Photonen. Philipp Lenard (1862 – 1947) identifizierte 1899 die Ladungsträger als Elektronen, indem er ihre spezifische Ladung durch Ablenkung in einem Magnetfeld bestimmte. Aus dem Anstieg der linearen Abhängigkeit der kinetischen Energie der Elektronen oberhalb von $f > f_{cr}$ bestimmte Millikan zwischen 1912 und 1915 den Zahlenwert für das Planck'sche Wirkungsquantum experimentell.

- Compton-Effekt

1922 beobachtet Arthur Compton (1892-1962) bei der Streuung von Röntgenstrahlen an Metallfolien eine Änderung der Wellenlänge des gestreuten Lichts.

$$\lambda - \lambda' \sim (1 - \cos\varphi)$$

φ - Streuwinkel des einfallenden Photons



Aus Sicht der (klassischen) Elektrodynamik würde eine einfallende elektromagnetische Welle ein zeitlich veränderliches Dipol induzieren, dass mit Intensität $I \sim (1 + \cos^2 \theta)$ abstrahlt. Der beobachtete Unterschied in der Wellenlänge der einfallenden und gestreuten Welle bleibt klassisch unklar.

Interpretation von Compton und Petrus Josephus Wilhelmus Debye (1884-1966):

Röntgenstrahlen bestehen aus Photonen mit $E = \hbar \omega$ und $\underline{p} = \hbar \underline{k}$. Die Energie- und

Impulsbilanz bei der inelastischen Streuung eines Photons an einem schwach gebundenen (ruhenden) e^- lautet ($\beta = v/c$, m_e – Ruhemasse des Elektrons)

$$\hbar\omega = \hbar\omega' + \frac{m_e c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - m_e c^2 \quad \text{bzw.} \quad \hbar\underline{k} = \hbar\underline{k}' + \frac{m_e \underline{v}}{\sqrt{1 - \beta^2}}.$$

Daraus folgt nach einiger Rechnung (Übungsblatt) für die Wellenlängenänderung

$$\lambda' - \lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_e c} (1 - \cos\varphi).$$

Der konstante Faktor $\frac{h}{m_e c} =: \lambda_c$ heißt Compton-Wellenlänge. Er ist ein Maß für die räumliche

Ausdehnung des Streuzentrums / hier des Elektrons.

B: Elektronen: Teilchen oder Wellen

In der Mechanik und der Elektrodynamik ist uns das Elektron als Punktladung mit der Masse m_e und der Ladung $-e$ vertraut.

1927 untersuchten Davisson und Germer die Beugung von Elektronen an Kristallgittern (Ni). Sie beobachteten ein Interferenzbild, sobald die Wellenlänge der Elektronen in den Bereich der Gitterkonstanten von einigen Angström (10^{-10} m) gelangte.

„Welleneigenschaften“ anderer „Teilchen“: Anton Zeilinger hat 1988 Interferenzbilder bei der Beugung von Neutronen ($m_n \sim 2000 m_e$) am Doppelspalt mit Gitterkonstante $a \sim 0.1$ mm nachgewiesen, im Jahre 2000 sogar bei Verwendung von Fullerenen ("Bälle" aus 70 C-Atomen).

Fazit: Welle-Teilchen-Dualismus (de Broglie, 1923):

Alle „Teilchen“ haben „Welleneigenschaften“ alle "Wellen" besitzen Teilcheneigenschaften".

Für freie Teilchen wird die Zuordnung

$$\underline{E} = \hbar \omega, \quad \underline{p} = \hbar \underline{k} \quad \rightarrow \text{"Teilchenbild"}$$

de Broglie-Relationen (1.1)

$$\underline{\psi}(\underline{r}, t) = \psi_0 e^{i(\underline{k}\underline{r} - \omega t)} \quad \rightarrow \text{"Wellenbild"}$$

postuliert. Anders Formuliert: In Abhängigkeit von der gewählten experimentellen Situation müssen das Teilchenbild zur Erklärung der experimentellen Befunde herangezogen werden.

Am Beispiel von Licht und Elektronen bedeutet das:

	„Wellenexperiment“ z.B. Beugung am Doppelspalt	„Teilchenexperiment“ z.B. Compton- oder Photoeffekt
Licht	ω, \underline{k} mit $\omega = c k$	$E = \hbar \omega, \quad \underline{p} = \hbar \underline{k}$ mit $E = c p$ (Photon)
Elektron	$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \underline{k} = \frac{\underline{p}}{\hbar}$ mit $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m_e}$	E, \underline{p} mit $E = \frac{p^2}{2m_0}$ (nichtrelativistisch) oder $E = \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 p^2}$ (relativistisch)

Einige numerische Abschätzungen:

■ Sandkorn: Sei $v \approx 1 \text{ mm s}^{-1}$, $m \approx 10^{-6} \text{ g}$ folgt $\lambda = \frac{h}{p} \approx 6 \cdot 10^{-22} \text{ m}$.

Zum Vergleich: Protonendurchmesser $\approx 10^{-15} \text{ m}$ \rightarrow makroskopische Körper besitzen extrem kleine de Broglie-Wellenlängen.

■ Für niederenergetische (nicht relativistische) Elektronen mit $\frac{p^2}{2m_e} \approx 1 \text{ eV}$ folgt

$$\lambda = \frac{h}{p} \approx 10^{-9} \text{ m} \approx 10 \text{ \AA} .$$

Solche Elektronen können bei Beugung an Kristallen mit Gitterkonstanten von einigen \AA Interferenzbilder erzeugen (Davisson, Germer).

1.2 Die Schrödinger-Gleichung (SG)

19-4-17

A: Freie Teilchen

Erinnere: Eine (1D) ebene Welle $u(x, t) = u_0 e^{i(kx - \omega t)}$ löst die lineare Wellengleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0 \quad (\rightarrow \text{Licht als elektromagnetische Welle im Vakuum}), \text{ wenn}$$

$$(ik)^2 - \frac{(i\omega)^2}{c^2} = 0, \text{ also } \omega = ck \text{ bzw. (de Broglie) } \frac{E}{\hbar} = c \frac{p}{\hbar}, \text{ d.h. } E = cp \text{ gilt. Das ist die}$$

relativistische Energie-Impuls-Beziehung für Teilchen ohne Ruhemasse, wie die Photonen.

Frage: Wie könnte eine Wellengleichung für freie Teilchen mit der nichtrelativistischen

Energie-Impuls-Relation $E = \frac{p^2}{2m}$ aussehen, damit ihre Lösungen ebene de Broglie-Wellen

$$\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \text{ sind?}$$

Für $E = \frac{p^2}{2m}$ ist wegen $E = \hbar \omega$ und $p = \hbar k$ nicht wie oben $\omega \sim k$ (\rightarrow lineare Dispersion),

sondern $\omega \sim k^2$ (\rightarrow nichtlineare Dispersion). Deshalb versuchen wir den Ansatz

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \alpha \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0 . \text{ Für die Konstante } \alpha \text{ ergibt sich } (ik)^2 + i\alpha\omega = 0 . \text{ Daraus folgt}$$

$$\hbar\omega = \frac{\hbar k^2}{i\alpha} = \frac{\hbar^2 k^2}{i\alpha\hbar}, \text{ also } \hbar\omega = E = \frac{p^2}{2m}, \text{ d.h. } i\alpha\hbar = 2m \text{ und somit } \alpha = -\frac{2m}{\hbar} i .$$

Insgesamt erhalten wir

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \text{ mit der Lösung } \underline{\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(k \cdot x - \omega t)}} \text{ f\u00fcr } \underline{\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}} \text{ bzw. } \underline{E = \frac{p^2}{2m}}.$$

Diese Gleichung beschreibt ein freies, nichtrelativistisches „quantenmechanisches“ Teilchen als ebene Welle mit nichtlinearer Dispersionsrelation $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$, der wegen der de Broglie-

Relationen die gew\u00fcnschte Energie-Impuls-Beziehung $E = \frac{p^2}{2m}$ entspricht.

B: Schr\u00f6dinger-Gleichung f\u00fcr die Bewegung im Kraftfeld $U(\underline{r}, t)$. Statistische Interpretation der Wellenfunktion

Erwin Schr\u00f6dinger (1887-1961) postulierte f\u00fcr die Bewegung eines Teilchens unter dem Einfluss der Kraft $\underline{F}(\underline{r}, t) = -\text{grad } U(\underline{r}, t)$ die Gleichung

$$\underline{i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\underline{r}, t) + U(\underline{r}, t) \psi(\underline{r}, t)} \quad \rightarrow \text{Schr\u00f6dinger-Gleichung (1926)} \quad (1.2)$$

f\u00fcr die i.a. komplexe Wellenfunktion (WF) $\psi(\underline{r}, t)$.

Welcher Zusammenhang besteht zwischen der komplexwertigen WF und dem (qm) Teilchen?

- Statistische Interpretation der Wellenfunktion (WF) als Wahrscheinlichkeitsamplitude durch Max Born (1882-1970) im Jahr 1927:

$$|\psi(\underline{r}, t)|^2 d^3r = \psi(\underline{r}, t) \psi^*(\underline{r}, t) d^3r \quad (1.3)$$

ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zum Zeitpunkt t im Volumenelement d^3r am Ort mit dem Radiusvektor \underline{r} aufzufinden/nachzuweisen.

Wegen dieser statistischen Interpretation interessieren uns nur die normierbaren Lösungen $\psi(\underline{r}, t)$ der SG (1.2), für die

$$\int_V d^3r |\psi(\underline{r}, t)|^2 = 1 \quad (\text{für alle } t) \quad (1.4)$$

gilt, wobei V der dem Teilchen zugängliche Raumbereich ist. Da mit $\psi(\underline{r}, t)$ auch $\text{const} \cdot \psi(\underline{r}, t)$ Gleichung (1.2) löst, ist die Forderung der Normierbarkeit unproblematisch, solange $\psi(\underline{r}, t)$ quadratisch integrabel ist.

Die statistische Interpretation der Wellenfunktion ist eine der Ursachen der „konzeptionellen Schwierigkeiten“ der QM, ihre tiefere Analyse führt auf die Unschärferelation.

• Statistische Interpretation und Zeitinvarianz

Klassische Mechanik: Die Newton'sche Bewegungsgleichung $m \frac{d^2 \underline{r}}{dt^2} = \underline{F}$ für die Bahnkurve $\underline{r}(t)$ ist invariant gegen Zeitumkehr $t \rightarrow -t$. Mit der Bewegung $\underline{r}(t)$ („Film vorwärts“) verstößt auch die Bewegung $\underline{r}(-t)$ („Film rückwärts“) gegen kein einziges Gesetz der klassischen Mechanik.

Quantenmechanik: Mit $\psi(\underline{r}, t)$ ist $\psi^*(\underline{r}, -t)$, nicht jedoch $\psi(\underline{r}, -t)$ Lösung der Schrödinger-Gleichung, denn diese ist invariant unter $t \rightarrow -t$ bei gleichzeitiger komplexer Konjugation. Damit ist die für die Messung relevante Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte invariant gegenüber Zeitumkehr

$$\psi(\underline{r}, t) \psi^*(\underline{r}, t) \xrightarrow{t \rightarrow -t} \psi(\underline{r}, -t) \psi^*(\underline{r}, -t) = \psi^*(\underline{r}, -(-t)) \psi^{**}(\underline{r}, -(-t)) = \psi^*(\underline{r}, t) \psi(\underline{r}, t) -$$

auch die SG beschreibt eine reversible Zeitentwicklung!

- **Kontinuitätsgleichung für Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte** $w(\underline{r}, t) := \psi(\underline{r}, t)\psi^*(\underline{r}, t)$

Nach einfachen Umformungen folgt aus der Schrödinger-Gleichung

$$\frac{\partial w(\underline{r}, t)}{\partial t} + \operatorname{div} \underline{j}(\underline{r}, t) = 0 \quad \text{mit } w(\underline{r}, t) := \psi^*(\underline{r}, t)\psi(\underline{r}, t)$$

$$\text{und } \underline{j}(\underline{r}, t) := \frac{i\hbar}{2m} \underline{\nabla} \cdot (\psi(\underline{r}, t)\underline{\nabla}\psi^*(\underline{r}, t) - \psi(\underline{r}, t)^*\underline{\nabla}\psi(\underline{r}, t)). \quad (1.5)$$

Gleichung (1.5) ist die Kontinuitätsgleichung für die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $w(\underline{r}, t)$, d.h. $\underline{j}(\underline{r}, t)$ gibt die Wahrscheinlichkeitsstromdichte an. Die Kontinuitätsgleichung kann als lokale Formulierung der Normierungsbedingung (Erhaltung der Wahrscheinlichkeit) interpretiert werden.

Beweis :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi \quad | \cdot \psi^*$$

$$\rightarrow -i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^* + U\psi^* \quad | \cdot \psi$$

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{i\hbar} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) = \frac{i\hbar}{2m} \underline{\nabla} \cdot (\psi^* \underline{\nabla} \psi - \psi \underline{\nabla} \psi^*)$$

$$\text{denn } \underline{\nabla} \cdot (\psi^* \underline{\nabla} \psi - \psi \underline{\nabla} \psi^*) = \underbrace{(\underline{\nabla} \psi^*) \cdot \underline{\nabla} \psi}_{\dots} + \psi^* \nabla^2 \psi - \underbrace{(\underline{\nabla} \psi) \cdot \underline{\nabla} \psi^*}_{\dots} - \psi \nabla^2 \psi^* = \psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^* .$$

FAZIT:

Die Gleichungen (1.2) bis (1.4) bilden die Basis der Schrödinger'schen Wellendynamik. Es hat sich gezeigt, dass sie nichtrelativistische Teilchen ohne Spin korrekt beschreiben.

• **Bewegung im zeitunabhängigen Feld**

Klassische Mechanik:

$$m \frac{d^2 \underline{r}}{dt^2} = -\text{grad } U(\underline{r}) \quad \left| \cdot \frac{d\underline{r}}{dt} \right., \quad m \frac{d^2 \underline{r}}{dt^2} \cdot \frac{d\underline{r}}{dt} + \frac{d\underline{r}}{dt} \cdot \text{grad } U(\underline{r}) = 0, \quad \frac{d}{dt} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{d\underline{r}}{dt} \right)^2 + U(\underline{r}) \right] = 0$$

→ Energieerhaltung bei Bewegung im zeitunabhängigen Potenzial/konservativen Feld.

Wellenmechanik:

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}(\underline{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \tilde{\psi}(\underline{r}, t) + U(\underline{r}) \tilde{\psi}(\underline{r}, t)$$

Separationsansatz $\tilde{\psi}(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}) T(t)$ führt auf

$$i\hbar \psi \frac{dT}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} T \nabla^2 \psi + U \psi T \quad \left| : \psi T \neq 0 \rightarrow \underbrace{i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt}}_{\underline{r}\text{-unabhängig}} = \frac{1}{\psi} \underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U \psi \right)}_{t\text{-unabhängig}} = \text{const} =: E$$

Linke Seite der Gleichung: $i\hbar \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = E \rightarrow T(t) = T_0 e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$.

Vergleichen wir das mit dem de Broglie-Postulat $\psi(\underline{r}, t) = \psi_0 e^{i(\underline{k}\cdot\underline{r} - \omega t)}$ für das freie Teilchen, $U(\underline{r}, t) = \text{const}$, so folgt $E = \hbar \omega$, d.h., die zunächst unbekannte Separationskonstante E entspricht der Energie.

Rechte Seite der Gleichung: Der \underline{r} -abhängige Anteil der Wellenfunktion genügt der Gleichung

$$\underline{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\underline{r}) + U(\underline{r}) \psi(\underline{r}) = E \psi(\underline{r})} \rightarrow \underline{\text{stationäre Schrödinger-Gleichung}} \quad (1.6)$$

FAZIT: Bei Bewegung im zeitunabhängigen Potenzial lautet die Wellenfunktion

$$\underline{\tilde{\psi}(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}}$$
, wobei $\psi(\underline{r})$ die Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung

(1.6) und E die zulässigen Werte für die Energie des Teilchens sind. Die

Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ist zeitunabhängig

$$|\tilde{\psi}(\underline{r}, t)|^2 = \tilde{\psi}(\underline{r}, t)\tilde{\psi}^*(\underline{r}, t) = \psi(\underline{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \psi^*(\underline{r}) e^{+\frac{i}{\hbar}Et} = \psi(\underline{r}) \psi^*(\underline{r}) = |\psi(\underline{r})|^2 ,$$

deshalb sprechen wir von stationären Zuständen.

Kompakte Schreibweise der Schrödinger-Gleichung: Formal können wir schreiben

$$\underline{i\hbar \frac{\partial \psi(\underline{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\underline{r}, t)} \quad \text{mit} \quad \underline{\hat{H} := -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\underline{r}, t)} \rightarrow \text{Hamilton-Operator} \quad (1.2a)$$

Der Operator \hat{H} entsteht aus der klassischen Hamilton-Funktion des physikalischen Systems

$$H(\underline{p}, \underline{r}, t) = \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r}, t) \quad \text{über die formale Ersetzung/Korrespondenz}$$

$$\underline{H(\underline{p}, \underline{r}, t) \rightarrow \hat{H}(\hat{\underline{p}}, \hat{\underline{r}}, t)} \quad \text{entsprechend} \quad \underline{\underline{p} \rightarrow \hat{\underline{p}} = -i\hbar \nabla, \underline{r} \rightarrow \hat{\underline{r}} = \underline{r}} \rightarrow \text{Korrespondenzprinzip}$$

1.3 Einschub:

Korrespondenz zwischen klassischer Mechanik (KM) und Quantenmechanik (QM, Wellenmechanik) im Lichte der Hamilton-Jacobi-Theorie

Wir betrachten die Bewegung eines Teilchens in einem Kraftfeld $U(\underline{r}, t)$, d.h. es ist

$$H(\underline{p}, \underline{r}, t) = \frac{\underline{p}^2}{2m} + U(\underline{r}, t) .$$

KM: Die Bahnkurve des Teilchens kann aus Hamilton-Jacobi-Gleichung (HJG)

$$-\frac{\partial S(\underline{r}, t)}{\partial t} = H(\underline{r}, \nabla S, t) = \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + U(\underline{r}, t)$$

bestimmt werden. Das ist eine nichtlineare partielle Differentialgleichung für $S(\underline{r}, t)$. Entlang der gesuchten Bahnkurve stimmt $S(\underline{r}, t)$ mit der (reellen) Wirkung überein.

QM: Schrödinger-Gleichung für die (komplexe) Wellenfunktion

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \stackrel{\substack{\text{Korrespondenz-} \\ \text{prinzip}}}{=} H(\hat{\underline{r}}, \hat{\underline{p}}, t) \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(\underline{r}, t) \Psi \quad (\hat{\underline{r}} = \underline{r}, \hat{\underline{p}} = -i\hbar \nabla).$$

Wir versuchen, die SG durch Reihenentwicklung nach Potenzen von $i\hbar$ in der Form

$$\psi(\underline{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar} S(\underline{r}, t)}, \quad S(\underline{r}, t) = S_0(\underline{r}, t) + i\hbar S_1(\underline{r}, t) + (i\hbar)^2 S_2(\underline{r}, t) + \dots$$

zu lösen. Dabei beschränken wir uns auf den ersten und zweiten Term der Reihe und setzen

$$\psi(\underline{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(S_0 + i\hbar S_1)} = e^{\frac{i}{\hbar} S_0 - S_1} =: a(\underline{r}, t) e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\underline{r}, t)}.$$

Eingesetzt in die SG finden wir unter Verwendung von

$$\begin{aligned} \nabla \Psi &\cong e^{\frac{i}{\hbar} S_0} \left(\nabla a + \frac{i}{\hbar} a \nabla S_0 \right) \\ \nabla^2 \Psi &\cong e^{\frac{i}{\hbar} S_0} \left[\nabla^2 a + \frac{2i}{\hbar} \nabla a \cdot \nabla S_0 - \frac{1}{\hbar^2} a (\nabla S_0)^2 + \frac{2i}{\hbar} a \nabla^2 S_0 \right] \\ i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &\cong e^{\frac{i}{\hbar} S_0} \left(i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} - a \frac{\partial S_0}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

die Relation

$$a \frac{\partial S_0}{\partial t} - i\hbar \frac{\partial a}{\partial t} + \frac{a}{2m} (\nabla S_0)^2 - \frac{i\hbar}{2m} a \nabla^2 S_0 - \frac{i\hbar}{m} \nabla a \cdot \nabla S_0 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 a + U a = 0. \quad (\text{H1})$$

Die Terme der Ordnung \hbar^0 sind (für $a \neq 0$)

$$\frac{\partial S_0}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S_0)^2 + U = 0 \quad (\text{H2})$$

d.h. S_0 genügt der HJG: Im Sinne eines Grenzübergangs QM \rightarrow KM bei $\hbar \rightarrow 0$ ist die HJG der klassische Grenzfall der SG.

Die Terme der Ordnung \hbar^0 sind der Realteil von (H1), abgesehen vom Beitrag $\frac{1}{a} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 a$, der aber bereits von der Ordnung $O(\hbar^2)$ ist. Dieser Term beschreibt quantenmechanische Korrekturen zur klassischen Bewegung.

Die Terme der Ordnung \hbar^1 ergeben $\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{1}{2m} a \nabla^2 S_0 + \nabla a \cdot \nabla S_0 = 0$. Nach Multiplikation mit $2a$ folgt

$$\frac{\partial}{\partial t} a^2 + \operatorname{div} \left(a^2 \frac{\nabla S_0}{m} \right) = 0. \quad (\text{H3})$$

Zur Interpretation dieser Gleichung ist es hilfreich, die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(\underline{r}, t)|^2$ in der betrachteten Näherung auszurechnen

$$|\Psi|^2 = \Psi \Psi^* = e^{\frac{i}{\hbar} S_0 - S_1} e^{-\frac{i}{\hbar} S_0 - S_1} = e^{-2S_1} = a^2.$$

Also handelt es sich bei (H3) um die Kontinuitätsgleichung für die quantenmechanische Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte. Wir erkennen, dass die durch die Wellenfunktion beschriebene Bewegung i.a. nicht in eine Bewegung entlang einer bestimmten Bahnkurve übergeht. Stattdessen verschiebt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(\underline{r}, t)|^2$ im Laufe der

Zeit in Übereinstimmung mit den Gesetzen der KM, denn $\frac{\nabla S_0}{m} = \frac{\underline{p}}{m}$ ist ja die

Geschwindigkeit des klassischen Teilchens.