

# Quantenmechanik

Rainer Verch

Institut für Theoretische Physik  
Universität Leipzig

Vorlesung 05

## Zerfließen von Wellenpaketen

Das Ziel ist jetzt zu zeigen, dass unter sehr allgemeinen Bedingungen jedes Wellenpaket, das eine Lösung der freien Schrödingergleichung ist, mit der Zeit “zerfließt”, d.h. die Amplitude nimmt ab und das Profil des Funktionsverlaufs bzgl.  $\vec{x}$  verbreitert sich über den gesamten Raum.

Es sei  $\varphi_0 \in S(\mathbb{R}^3)$ ; dann setze

$$A(\vec{k}) = (2\pi)^{-3/2} \widehat{\varphi_0}(\vec{k}) \quad (\vec{k} \in \mathbb{R}^3). \quad \text{Damit ergibt sich} \quad \varphi_0(\vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} A(\vec{k}) \quad (\vec{x} \in \mathbb{R}^3),$$

wobei  $\vec{k} \cdot \vec{x} = k_1x_1 + k_2x_2 + k_3x_3$  das Euklidische Skalarprodukt von Vektoren in  $\mathbb{R}^3$  ist.

Mit der Dispersionsrelation  $\omega(\vec{k}) = \hbar|\vec{k}|^2/(2m)$  ist das Wellenpaket

$$\varphi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3k e^{-i(\omega(\vec{k})t - \vec{k}\cdot\vec{x})} A(\vec{k})$$

eine Lösung der freien Schrödingergleichung mit den Anfangsdaten

$$\varphi(t=0, \vec{x}) = \varphi_0(\vec{x}) \quad (\vec{x} \in \mathbb{R}^3) \quad \text{bei } t=0.$$

Damit ergeben sich die beiden folgenden Eigenschaften:

- (i)  $\sup_{\vec{x} \in \mathbb{R}^3} |\varphi(t, \vec{x})|^2 \leq C/t^3$  mit einer geeigneten Konstante  $C > 0$ ,
- (ii)  $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\varphi(t, \vec{x})|^2$  ist konstant in  $t$ .

Nachweis der Eigenschaften (i) und (ii) :

Zu (i) :

Benutze die Form von  $\varphi(t, \vec{x})$  aus Satz 1.6.8, daraus folgt:

$$\begin{aligned} |\varphi(t, \vec{x})|^2 &= \left| \frac{m}{2\pi\hbar} \right|^2 \frac{1}{t^3} \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3y e^{im|\vec{x}-\vec{y}|^2/2\hbar t} \varphi_0(\vec{y}) \right|^2 \\ &\leq \left| \frac{m}{2\pi\hbar} \right|^2 \frac{1}{t^3} \left( \int_{\mathbb{R}^3} d^3y |e^{im|\vec{x}-\vec{y}|^2/2\hbar t} \varphi_0(\vec{y})| \right)^2 \\ &= \left| \frac{m}{2\pi\hbar} \right|^2 \frac{1}{t^3} \left( \int_{\mathbb{R}^3} d^3y |\varphi_0(\vec{y})| \right)^2 \end{aligned}$$

Das zeigt die Aussage (i), mit der positiven Konstanten

$$C = \left| \frac{m}{2\pi\hbar} \right|^2 \left( \int_{\mathbb{R}^3} d^3y |\varphi_0(\vec{y})| \right)^2$$

Zu (ii):

Im folgenden wird die Abkürzung

$$b_t(\vec{k}) = A(\vec{k})e^{-i\omega(\vec{k})t} \quad \text{benutzt.}$$

Damit ergibt sich, wenn für  $\varphi(t, \vec{x})$  die Darstellung als Wellenpaket eingesetzt wird:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} dx |\varphi(t, \vec{x})|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \left| \int_{\mathbb{R}^3} d^3k A(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \right|^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3x (2\pi)^3 |\check{b}_t(\vec{x})|^2 \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3k (2\pi)^3 |b_t(\vec{k})|^2 \quad (\text{Parsevalsche Gleichung}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} d^3k (2\pi)^3 |A(\vec{k})|^2 \end{aligned}$$

Der letzte Ausdruck ist nicht abhängig von  $t$ , damit also zeitlich konstant.

## Was bedeutet das für “Welleneigenschaften materieller Teilchen”?

Wellenpakete  $\varphi(t, \vec{x})$ , die Lösungen der freien Schrödingergleichung sind, sollten im Sinne von de Brogliès Hypothese Welleneigenschaften von Elementarteilchen, z.B. Elektronen, beschreiben.

Weil  $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x |\varphi(t, \vec{x})|^2$  zeitunabhängig ist, erscheint es naheliegend, diese integrierte Größe als die Ladung oder Masse eines (oder einiger weniger) Elementarteilchen (wir denken an Elektronen) anzusehen.

Dann wäre es konsequent,  $\rho(t, \vec{x}) = |\varphi(t, \vec{x})|^2$  anzusehen als eine räumliche Ladungs- oder Massendichte zur Zeit  $t$ . Dies stößt aber auf Schwierigkeiten aufgrund der Eigenschaft (i): Diese Dichte hat die Eigenschaft

$$\sup_{\vec{x} \in \mathbb{R}^3} \rho(t, \vec{x}) \leq C/t^3$$

wegen der zeitlichen Konstanz von  $\int_{\mathbb{R}^3} d^3x \rho(t, \vec{x})$  bedeutet das: Wenn  $\rho(t, \vec{x})$  bei  $t = 0$  sehr scharf konzentriert war (etwa auf dem Größenbereich der Comptonwellenlänge des Elektrons), dann nimmt die Amplitude von  $\rho(t, \vec{x})$  mit wachsendem  $t$  gleichmäßig in  $\vec{x}$  ab (und zwar sehr schnell), wobei sich der Träger von  $\vec{x} \mapsto \rho(t, \vec{x})$  mit wachsendem  $t$  immer stärker ausdehnt.

Einen bildlichen Eindruck davon gibt es in dem youtube Video  
[www.youtube.com/watch?v=F2Tt80NhmyQ](http://www.youtube.com/watch?v=F2Tt80NhmyQ)

Ein solches Verhalten der Ladungsdichte z.B. eines Elektrons ist problematisch:

- Die Masse und die Ladung eines Elektrons zeigt sich in Experimenten immer sehr gut lokalisiert, über lange Zeiträume.
- Das Zerfließen von Wellenpaketen und die Interpretation von  $\rho(t, \vec{x}) = |\varphi(t, \vec{x})|^2$  als Massen- oder Ladungsdichte eines Elektrons hätte zur Folge, dass zu bestimmten Zeiten in endlich großen Raumbereichen Bruchteile der Elektronenladung bzw. Elektronenmasse beobachtet werden müssten. Das ist aber nicht der Fall.
- Wenn andererseits  $\varphi(t, \vec{x})$  eine Welleneigenschaft eines Elektrons beschreibt, z.B. die Interferenzfähigkeit von Elektronen in Beugungsexperimenten, dann würde diese Welleneigenschaft im Laufe der Zeit in endlichen Raumbereichen abnehmen. Somit hätten frei propagierende, “ältere” Elektronen eine geringere Interferenzfähigkeit als “jüngere”. Das wird aber nicht beobachtet. Elementarteilchen aus der kosmischen Strahlung haben hinsichtlich ihrer Interferenzfähigkeit dieselben Eigenschaften wie solche, die in irdischen Laboren hergestellt werden.

Fazit:

Die Welleneigenschaften materieller Teilchen, die gemäß der de Broglièschen Hypothese freien (keinen Kräften ausgesetzten) Elementarteilchen in der Form von Wellenpaketen mit der Dispersionsrelation  $\omega(\vec{k}) = \hbar|\vec{k}|^2/2m$  zugeschrieben werden sollen, können sich nicht auf ein einzelnes Elementarteilchen beziehen. Diese Auffassung stößt aufgrund des Zerfließens von Wellenpaketen, die Lösungen der freien Schrödingergleichung sind, auf Widersprüche mit den Beobachtungen.

Die erfolgreiche Deutung von Lösungen der (freien und allgemeinen) Schrödinger-Gleichung im Sinne von Wahrscheinlichkeiten geht auf Max Born zurück. Das werden wir im nächsten Kapitel genauer studieren. Zuvor werden wir Schrödingers Verallgemeinerung der Wellengleichung für materielle Teilchen betrachten — allerdings in einer nur sehr elementaren Weise. Ausführlichere Betrachtungen dazu finden sich z.B. in Straumanns Buch.

### Die Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen in einem stationären externen Potential

Erwin Schrödinger suchte (1926) eine Verallgemeinerung für eine “Wellengleichung” der “Wellenfunktion” von materiellen, geladenen Teilchen (Elektronen), die sich in einem äußeren, stationären Kraftfeld bewegen.

$$\vec{F}(\vec{x}) = -\vec{\nabla}U(\vec{x})$$

mit einer Potentialfunktion  $U : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$  “stückweise” glatt.

Die Energie des Teilchens ist nach der klassischen Mechanik

$$E = \frac{|p|^2}{2m} + U(\vec{x})$$

Setzt man wie zuvor nach de Broglie

$$E = \hbar\omega \quad \text{und} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|} = \frac{h}{|\vec{p}|} = \frac{h}{\sqrt{2m(E - U(\vec{x}))}}$$

d.h. man erhält bei fester Energie eine ortsabhängige Wellenlänge. Das erscheint nur sinnvoll, wenn sich  $U(\vec{x})$  über den Bereich der Wellenlänge nur sehr wenig ändert.

Mit

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2|\vec{k}|^2}{2m} + U(\vec{x})$$

betrachtet man dann das “verallgemeinerte” Wellenpaket (da  $\omega(\vec{k}, \vec{x})$  zunächst ortsabhängig)

$$\psi(t, \vec{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} d^3k A(\vec{k}) e^{-i\left(\left[\frac{\hbar|\vec{k}|^2}{2m} + \frac{1}{\hbar}U(\vec{x})\right]t - \vec{k}\vec{x}\right)}$$



Falls  $A(\vec{k})$  sehr ausgebreitet  $\Rightarrow \check{A}(\vec{x})$  sehr stark konzentriert, z.B.

$$\begin{aligned} A(\vec{k}) &= \sqrt{a} e^{-a|\vec{k}|^2/2} e^{-i\vec{k}\vec{x}_0} \\ \Rightarrow \check{A}(\vec{x}) &= e^{-|\vec{x}-\vec{x}_0|^2/2a} \quad a > 0 \end{aligned}$$

D.h.  $\psi(t, \vec{x})$  ist für kleine  $t$  scharf um  $\vec{x}_0$  konzentriert wenn  $a > 0$  genügend klein.

Wenn angenommen wird, dass  $U(\vec{x})$  in der Umgebung von  $\vec{x}_0$ , wo  $\psi(t, \vec{x})$  für kleine  $t$  wesentlich von 0 verschieden ist (Bereich einer Wellenlänge), sich nahezu konstant verhält, d.h.

$|\partial U(\vec{x})/\partial x_j|$ ,  $|\partial^2 U(\vec{x})/\partial x_j \partial x_l|$  sind sehr klein, dann verhält sich  $\psi(t, \vec{x})$  in diesem Bereich wie ein Wellenpaket und erfüllt in guter Approximation die **Schrödingergleichung**

$$\text{(SG)} \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \vec{x}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\vec{x}) \right) \psi(t, \vec{x})$$

Schrödinger hat die Hypothese aufgestellt, dass die Schrödingergleichung (SG) auch allgemein – d.h. ohne die Beschränkung auf konzentrierte Wellenpakete und im Vergleich zur Ausdehnung des Wellenpakets im Wesentlichen konstante Potentiale – für alle  $t \in \mathbb{R}$  und  $\vec{x} \in \mathbb{R}^3$  gelten soll.

**Bem. 1.6.9.**

Die Schrödingergleichung (SG) ist eine der Grundgleichungen der Physik, ähnlich wie die Newtonschen Bewegungsgleichungen oder die Maxwell'schen Gleichungen.

Sie lässt sich nicht aus anderen physikalischen Prinzipien “herleiten”. Ihre wesentliche Rechtfertigung liegt darin, dass ihre Anwendung in der Quantenmechanik für mikroskopische Teilchen in stationären Potentialen im Vergleich mit Experimenten hervorragende Ergebnisse, d.h. Übereinstimmung mit sehr großer Genauigkeit, ergibt.