

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

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

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

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

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

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

Der Tunneffekt

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

⁴Die Knotenzahl entspricht der Anzahl Nullstellen der Wellenfunktion

Auf diesen quantenmechanischen Effekt, den sogenannten *Tunneleffekt*, gehen wir in diesem Abschnitt genauer ein.

Der Tunneleffekt wurde in zahlreichen Experimenten verifiziert, z.B. beim radioaktiven Zerfall oder in elektronischen Tunneldioden. Der Tunneleffekt wird z.B. im Rastertunnelmikroskop (siehe Abschnitt 7.2.3), welches zur Abbildung der Oberfläche verwendet werden kann, auch technisch angewandt. Dessen Funktionsweise beruht darauf, dass es für Elektronen möglich ist die Potentialbarriere zwischen der abtastenden Spitze und der zu untersuchenden Oberfläche einer Probe zu überwinden.

Das Ziel der folgenden Rechnung ist es, die sogenannte *Transmissionswahrscheinlichkeit*, auch *Transmissionskoeffizient* genannt, eines Teilchens durch eine Potentialbarriere zu bestimmen. Die Definition lautet folgendermassen:

Definition 9.12 Die *Transmissionswahrscheinlichkeit* T ist definiert als der transmittierte Teilchenfluss S_{trans} geteilt durch den einfallenden Teilchenfluss S_{ein} und ist damit ein Mass für die Stärke des Tunneleffekts

$$T = \frac{S_{\text{trans}}}{S_{\text{ein}}}. \quad (9.174)$$

Der Teilchenfluss S ist dabei gegeben durch

$$S = |u(x)|^2 v, \quad (9.175)$$

d.h. als Produkt von Wahrscheinlichkeitsdichte $|u(x)|^2$ und Teilchengeschwindigkeit v .

Wir beginnen unsere Berechnung, indem wir die x-Achse in drei Bereiche I, II und III unterteilen (vgl. Abb. 9.9), für die wir die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (Potential ist zeitunabhängig) separat lösen

$$\text{I:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{I}}(x) = E u_{\text{I}}(x), \quad (9.176)$$

$$\text{II:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{II}}(x) + V_0 u_{\text{II}}(x) = E u_{\text{II}}(x), \quad (9.177)$$

$$\text{III:} \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_{\text{III}}(x) = E u_{\text{III}}(x). \quad (9.178)$$

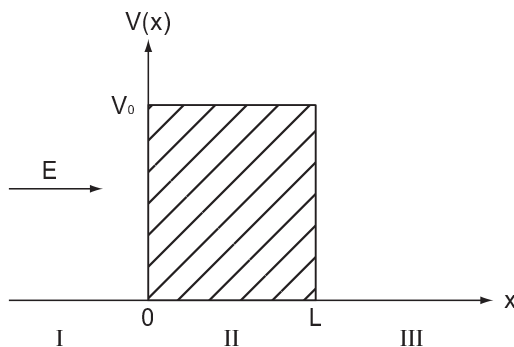


Abb. 9.9: Ein Teilchen mit kinetischer Energie E trifft auf eine Potentialbarriere der Höhe $V_0 > E$ und der Breite L .

Die Lösung für die drei Bereiche lassen sich analog zu den vorangegangenen Beispielen mit Hilfe eines Exponentialansatzes bestimmen. Wir verzichten daher auf eine Herleitung und geben direkt die Lösungen für die Wellenfunktionen u_I , u_{II} und u_{III} in den drei Bereichen an

$$\text{I: } u_I(x) = \underbrace{Ae^{ik_I x}}_{\substack{\text{einfallende} \\ \text{Welle}}} + \underbrace{Be^{-ik_I x}}_{\substack{\text{reflektierte} \\ \text{Welle}}} \quad \text{mit } k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad (9.179)$$

$$\text{II: } u_{II}(x) = \underbrace{Ce^{k_{II}x} + De^{-k_{II}x}}_{\substack{\text{zerfallende Wellenfunktion} \\ \text{in der Barriere}}} \quad \text{mit } k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \quad (9.180)$$

$$\text{III: } u_{III}(x) = \underbrace{Fe^{ik_{III}x}}_{\substack{\text{rechtslaufende} \\ \text{Welle}}} + \underbrace{Ge^{-ik_{III}x}}_{\substack{\text{linkslaufende} \\ \text{Welle}}} \quad \text{mit } k_{III} = k_I = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (9.181)$$

Es ist zu bemerken, dass im Bereich III aufgrund der betrachteten Situation (Teilchen kommt von links) nur eine rechtslaufende Welle existieren kann und daher $G = 0$ ist. Die anderen Koeffizienten A , B , C , D und F ergeben sich aus den Stetigkeitsbedingungen bei $x = 0$ und $x = L$ für die Wellenfunktion und deren Ableitung nach x . Bevor wir die Koeffizienten A , B , C , D und F aus diesen Stetigkeitsbedingungen berechnen, gehen wir zurück zu unserem ursprünglichen Ziel, der Bestimmung der Transmissionwahrscheinlichkeit T . Mit (9.179) und (9.181) ergibt sich nach Definition 9.12 der folgende Ausdruck

$$T = \frac{S_{\text{trans}}}{S_{\text{ein}}} = \frac{|u_{III}(x)|^2 v_{III}}{|u_{I,\text{ein}}(x)|^2 v_I} = \frac{FF^*}{AA^*}, \quad (9.182)$$

wobei $u_{I,\text{ein}}(x)$ den einfallenden Anteil der Wellenfunktion $u_I(x)$ bezeichnet. Ausserdem haben wir im letzten Schritt verwendet, dass $v_I = v_{III}$, da sich das Teilchen in beiden Regionen I und III im potentialfreien Raum bewegt und beim Tunnelprozess keine kinetische Energie verliert. Demzufolge genügt es das Verhältnis A/F aus den Stetigkeitsbedingungen zu bestimmen. Diese sind gegeben durch

$$u_I(0) = u_{II}(0) \rightarrow A + B = C + D, \quad (9.183)$$

$$u_{II}(L) = u_{III}(L) \rightarrow Ce^{k_{II}L} + De^{-k_{II}L} = Fe^{ik_I L}, \quad (9.184)$$

$$\frac{\partial u_I}{\partial x}(0) = \frac{\partial u_{II}}{\partial x}(0) \rightarrow Aik_I - Bik_I = Ck_{II} - Dk_{II}, \quad (9.185)$$

$$\frac{\partial u_{II}}{\partial x}(L) = \frac{\partial u_{III}}{\partial x}(L) \rightarrow Ck_{II}e^{k_{II}L} - Dk_{II}e^{-k_{II}L} = Fik_I e^{ik_I L}. \quad (9.186)$$

In Matrixschreibweise lautet dieses Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_{II}L} & e^{-k_{II}L} & -e^{ik_{I}L} \\ ik_{I} & -ik_{I} & -k_{II} & k_{II} & 0 \\ 0 & 0 & k_{II}e^{k_{II}L} & -k_{II}e^{-k_{II}L} & -ik_{I}e^{ik_{I}L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ F \end{pmatrix} = 0. \quad (9.187)$$

Elementare Zeilenumformungen für lineare Gleichungssysteme liefern

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & -2ik_{I} & -k_{II} + ik_{I} & k_{II} + ik_{I} & 0 \\ 0 & 0 & e^{k_{II}L} & e^{-k_{II}L} & -e^{ik_{I}L} \\ 0 & 0 & 0 & -2k_{II}e^{-k_{II}L} & (-ik_{I} + k_{II})e^{ik_{I}L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \\ F \end{pmatrix} = 0. \quad (9.188)$$

Wir drücken nun mit (9.188) Schritt für Schritt die Koeffizienten A , B , C und D durch den Koeffizient F aus, um dann schliesslich zum Verhältnis A/F zu gelangen. Für den Koeffizient D ergibt sich

$$D = \left(-\frac{ik_{I}}{2k_{II}} + \frac{1}{2} \right) e^{(ik_{I}+k_{II})L} F. \quad (9.189)$$

Damit erhalten wir für den Koeffizient C

$$\begin{aligned} C &= -e^{-2k_{II}L} D + e^{(ik_{I}-k_{II})L} F \\ &= \left(\frac{ik_{I}}{2k_{II}} + \frac{1}{2} \right) e^{(ik_{I}-k_{II})L} F. \end{aligned} \quad (9.190)$$

Für den Koeffizient B resultiert

$$\begin{aligned} B &= \left(-\frac{k_{II}}{2ik_{I}} + \frac{1}{2} \right) C + \left(\frac{k_{II}}{2ik_{I}} + \frac{1}{2} \right) D \\ &= \left(\left(-\frac{k_{II}}{4ik_{I}} + \frac{ik_{I}}{4k_{II}} \right) e^{(ik_{I}-k_{II})L} + \left(\frac{k_{II}}{4ik_{I}} - \frac{ik_{I}}{4k_{II}} \right) e^{(ik_{I}+k_{II})L} \right) F. \end{aligned} \quad (9.191)$$

Schlussendlich erhalten wir daraus für das Verhältnis A/F

$$\begin{aligned} \frac{A}{F} &= -\frac{B}{F} + \frac{C}{F} + \frac{D}{F} \\ &= \left(\frac{k_{II}}{4ik_{I}} - \frac{ik_{I}}{4k_{II}} \right) e^{(ik_{I}-k_{II})L} + \left(-\frac{k_{II}}{4ik_{I}} + \frac{ik_{I}}{4k_{II}} \right) e^{(ik_{I}+k_{II})L} \\ &\quad + \left(\frac{ik_{I}}{2k_{II}} + \frac{1}{2} \right) e^{(ik_{I}-k_{II})L} + \left(-\frac{ik_{I}}{2k_{II}} + \frac{1}{2} \right) e^{(ik_{I}+k_{II})L} \\ &= \left(\frac{1}{2} - \frac{i}{4} \left(\frac{k_{II}}{k_{I}} - \frac{k_{I}}{k_{II}} \right) \right) e^{(ik_{I}-k_{II})L} + \left(\frac{1}{2} + \frac{i}{4} \left(\frac{k_{II}}{k_{I}} - \frac{k_{I}}{k_{II}} \right) \right) e^{(ik_{I}+k_{II})L}. \end{aligned} \quad (9.192)$$

Wir vereinfachen diesen Ausdruck, indem wir folgende zwei Annahmen tätigen:

1. Die Teilchenenergie E sei klein gegenüber der Höhe der Potentialbarriere V_0 , d.h. $E \ll V_0$. Damit ergibt sich: $k_{\text{II}} \gg k_{\text{I}}$ und daraus

$$\frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}} - \frac{k_{\text{I}}}{k_{\text{II}}} \sim \frac{k_{\text{II}}}{k_{\text{I}}}. \quad (9.193)$$

2. Für die Breitenbreite L sei $k_{\text{II}}L \gg 1$, d.h. wir betrachten breite Barrieren. Daraus folgt

$$e^{k_{\text{II}}L} \gg e^{-k_{\text{II}}L}. \quad (9.194)$$

Mit diesen beiden Annahmen (9.193) und (9.194) vereinfacht sich der Ausdruck (9.192) für das Verhältnis A/F folgendermassen

$$\frac{A}{F} = \left(\frac{1}{2} + \frac{ik_{\text{II}}}{4k_{\text{I}}} \right) e^{(ik_{\text{I}}+k_{\text{II}})L}. \quad (9.195)$$

Einsetzen in (9.182) liefert für die Transmissionswahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} T &= \frac{FF^*}{AA^*} \\ &\sim \left(\frac{1}{2} + \frac{ik_{\text{II}}}{4k_{\text{I}}} \right)^{-1} e^{-(ik_{\text{I}}+k_{\text{II}})L} \left(\frac{1}{2} - \frac{ik_{\text{II}}}{4k_{\text{I}}} \right)^{-1} e^{-(-ik_{\text{I}}+k_{\text{II}})L} \\ &= \frac{16}{4 + (k_{\text{II}}/k_{\text{I}})^2} e^{-2k_{\text{II}}L}. \end{aligned} \quad (9.196)$$

Mit den Ausdrücken $k_{\text{I}} = \sqrt{2mE}/\hbar$ und $k_{\text{II}} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$ ergibt sich das folgende Schlussresultat

$$T = \frac{16}{3 + V_0/E} e^{-2\sqrt{2m(V_0 - E)}L/\hbar}. \quad (9.197)$$

D.h. die Transmissionswahrscheinlichkeit zeigt eine starke exponentielle Abhängigkeit von Teilchenenergie E und der Breite der Barriere L .

Um nun eine Vorstellung über die Stärke des Tunneleffekts zu erhalten, betrachten wir das folgende Beispiel: Ein Elektron mit kinetischer Energie $E = 1$ eV bewegt sich auf eine Potentialbarriere der Höhe $V_0 = 10$ eV und Breite $L = 0.5$ nm zu. Wie gross ist die Transmissionswahrscheinlichkeit T , d.h. die Wahrscheinlichkeit, dass das Elektron die Barriere überwinden kann? Einsetzen der Werte in (9.197) liefert das folgende Ergebnis

$$T = \frac{16}{3 + V_0/E} e^{-2\sqrt{2m(V_0 - E)}L/\hbar} = 2.6 \cdot 10^{-7}. \quad (9.198)$$

Das bedeutet, dass selbst für leichte Teilchen und niedrige Barrieren die Transmissionswahrscheinlichkeit T sehr klein ist. Dennoch ist der Tunneleffekt experimentell beobachtbar und findet, wie bereits zu Beginn des Abschnitts erwähnt, zum Beispiel beim Rastertunnelmikroskop⁵ (vgl. Abschnitt 7.2.3) seine Anwendung.

⁵Für das Design des ersten Rastertunnelmikroskops erhielten G. Binnig und H. Rohrer 1986 den Nobelpreis.

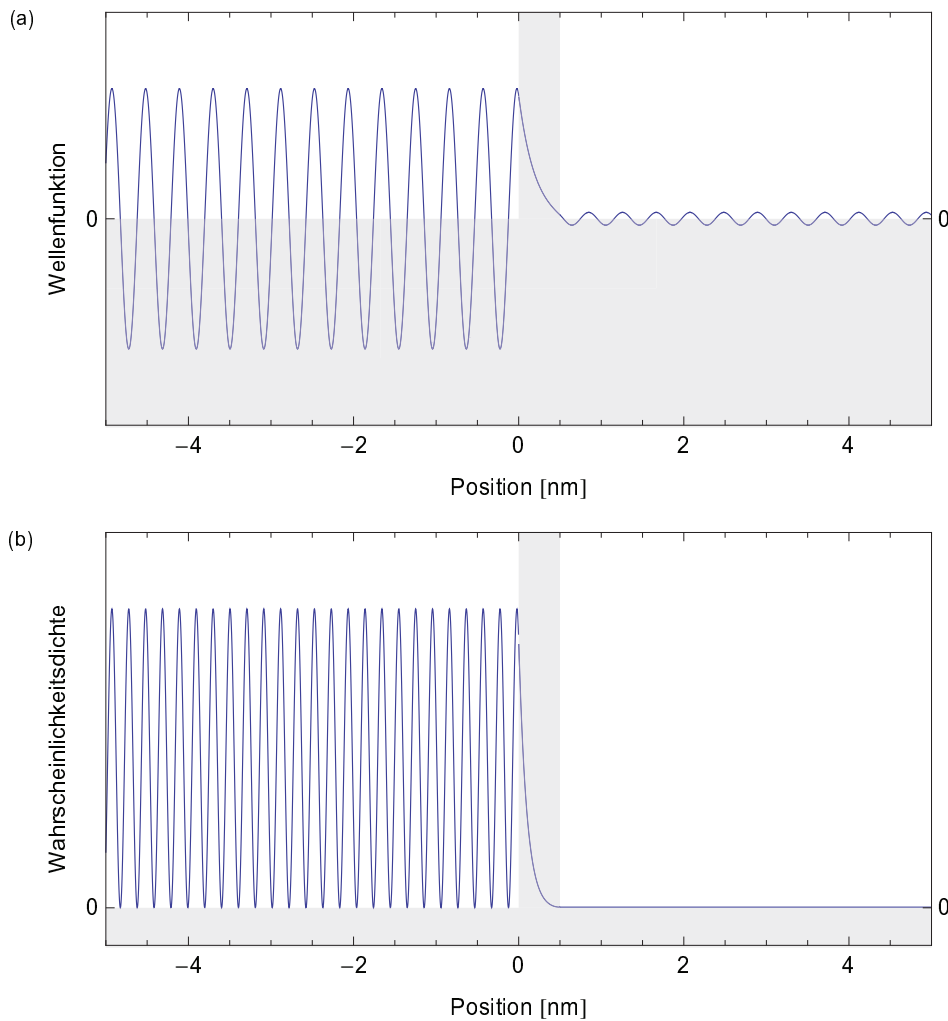


Abb. 9.10: Mathematica Berechnung der (a) Wellenfunktion $Re[u(x)]$ und (b) Wahrscheinlichkeitsdichte $|u(x)|^2$ für ein Elektron, das sich mit einer kinetischen Energie $E = 9$ eV auf eine Potentialbarriere der Höhe $V_0 = 10$ eV und Breite $L = 0.5$ nm zubewegt und diese „tunnelt“.

Zum Abschluss dieses Abschnitts geben wir das Resultat einer Mathematica Berechnung für die Wellenfunktion (Realteil) und die entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichte für die Zahlenwerte $E = 9$ eV, $V_0 = 10$ eV und $L = 0.5$ nm wider, siehe Abb. 9.10. Aus dieser graphischen Darstellung wird ersichtlich, dass die Wellenfunktion vor und nach der Potentialbarriere oszilliert und innerhalb der Barriere exponentiell abfällt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte oszilliert ebenfalls vor der Potentialbarriere, da sich dort eine stehende Welle aus einfallender und reflektierter Materiewelle ausbildet. Innerhalb der Barriere fällt die Wahrscheinlichkeitsdichte exponentiell ab und hat nach der Barriere einen konstanten Wert, da sich das Teilchen dort als ebene Welle nur nach rechts ausbreitet.

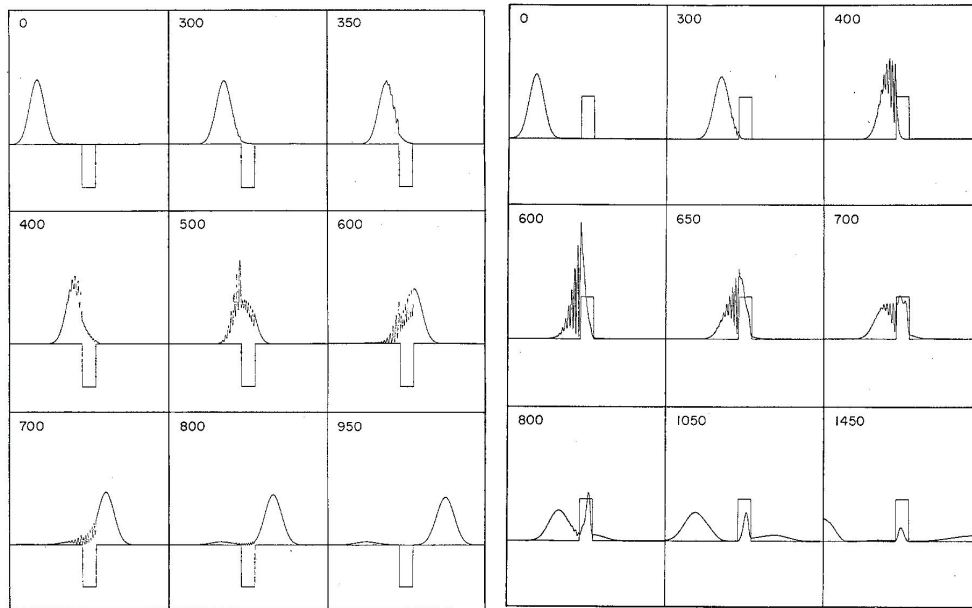


Abb. 9.11: Computerberechnungen für die Bewegung eines Gaussischen Wellenpakets durch einen Potentialtopf (links) und durch eine Potentialbarriere (rechts) für den Fall $\langle E \rangle = V_0$. [11]

Bewegung eines Wellenpakets durch einen Potentialtopf / Potentialbarriere

Wie bereits zuvor diskutiert ergibt sich ein Wellenpaket als Superposition von vielen harmonischen Wellen mit verschiedenen Frequenzen ω und Wellenzahlen k . Die verschiedenen Frequenzen ω entsprechen verschiedenen Energien $\hbar\omega$.

Wir betrachten hier die Bewegung eines Gaussischen Wellenpakets durch einen Potentialtopf der Tiefe V_0 und durch eine Potentialbarriere der Höhe V_0 hindurch. Dieses Problem lässt sich durch Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (9.93) bearbeiten. Die Berechnung eines solchen Problems lässt sich nur schwierig von Hand bewältigen. Wir geben hier das Resultat einer Computerberechnung wieder, welche von A. Goldberg und seinen Mitarbeitern im Jahr 1967 [11] durchgeführt wurde. Diese zeigen, dass sich das Wellenpaket am Potentialtopf und an der Barriere, für den Fall dass die Teilchenenergie sehr viel grösser ist als die Topftiefe oder die Barrierenhöhe ($\langle E \rangle \gg V_0$), im Wesentlichen wie ein klassisches Teilchen verhält. Das Teilchen überwindet die durch die Barriere oder den Topf dargestellte Störung mit hoher Wahrscheinlichkeit und wird nur mit einer niedrigen Wahrscheinlichkeit reflektiert. Für $\langle E \rangle \ll V_0$ wird das Teilchen sowohl vom Topf als auch von der Barriere reflektiert. Für die Barriere entspricht dies angenähert ebenfalls den klassischen Vorstellungen. Drastische Abweichung vom klassischen Verhalten kommen jedoch zum Vorschein, wenn die Teilchenenergie von ähnlicher Grösse ist wie die Barrierenhöhe oder die Topftiefe, siehe Abb. 9.11. Vergleiche dazu die Ausführungen zum Tunneleffekt im vorangegangenen Abschnitt.

9.5 Eigenwerte und Eigenfunktionen von Operatoren

9.5.1 Scharfe und unscharfe Werte von Observablen

Wir illustrieren zunächst die Bedeutung von scharfen bzw. unscharfen Observablen anhand von einigen Beispielen und geben anschliessend die genaue mathematische Definition. Bei den Beispielen beziehen wir uns auf die Heisenbergsche Unschärferelation (vgl. Abschnitt 9.2).

Stationäre Zustände

Bei der Bewegung eines Teilchens (Massepunkt) in einem zeitunabhängigen Potential bleibt die Gesamtenergie E konstant. Zur Messung der Energie steht damit eine beliebig lange Zeitspanne Δt zur Verfügung. Da $\Delta E \Delta t \sim h$, also endlich ist, kann die Unschärfe ΔE einer Messung der Energie beliebig klein werden. Man sagt in diesem Fall: Die Energie hat den *scharfen* Wert E .

Zum Beispiel haben wir beim Teilchen im Potentialtopf gesehen (vgl. Abschnitte 9.1.1 und 9.4.2), dass die Energie verschiedene scharfe und diskrete Werte E_n annehmen kann, welche durch die Quantenzahl n charakterisiert sind.

Bei genauerer Betrachtung findet man jedoch, dass die Schärfe der Differenz zweier Energien eines quantenmechanischen Systems immer durch die Lebensdauer der mit dem Übergang verknüpften Zustände begrenzt ist. Diese Zustände können, wie wir bereits kennengelernt haben, im Prozess der spontanen Emission, hervorgerufen durch die Wechselwirkung mit den Vakuumfluktuationen des elektromagnetischen Feldes, auf einer durch die Einsteinkoeffizienten bestimmten Zeitskala zerfallen.

Teilchen im räumlich und zeitlich konstanten Potential

Nach Abschnitt 9.4.2 ist die Lösung der Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im räumlich und zeitlich konstanten Potential eine ebene, harmonische Welle

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar}. \quad (9.199)$$

Da der Zustand stationär ist, ist die Energie scharf. Im Gegensatz zum Teilchen im Potentialtopf sind die Werte, die sie annehmen kann, jedoch beliebig und nicht diskret.

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ ist räumlich (und zeitlich) konstant. D.h. der genaue Aufenthaltsort des Teilchens ist unbestimmt oder mit anderen Worten, die Unschärfe Δx des Ortes ist unendlich. Da $\Delta p \Delta x \sim h$ endlich ist, verschwindet die Unschärfe Δp des Impulses p . D.h. neben der Energie E nimmt auch der Impuls p einen scharfen Wert an. Auch beim Impuls sind die Werte beliebig und nicht diskret.

Unscharfe Werte

Im Gegensatz zu diesen Beispielen haben wir bei der Beugung am Spalt (siehe Abschnitt 9.2.1) und beim Gauss'schen Wellenpaket (siehe Abschnitt 9.2.2)

gesehen, dass sowohl der Ort x als auch der Impuls p unscharfe Werte annehmen. Dabei sind die Unschärfen Δx und Δp von Ort und Impuls durch die Heisenbergsche Unschärferelation miteinander verknüpft.

Definition: Der scharfe Wert einer Observablen

Diesen Beispielen folgend geben wir nun eine mathematische Definition an, unter welchen Bedingungen der Erwartungswert $\langle F \rangle$ einer Observablen F scharf bestimmt ist.

Definition 9.13 Für ein Teilchen im Zustand ψ_0 ist der Erwartungswert $\langle F \rangle$ einer Observablen F **scharf** bestimmt, wenn bei wiederholter Messung an identisch gleich präparierten Teilchen immer der selbe Wert F_0 resultiert. Mathematisch bedeutet das, dass die Unschärfe ΔF verschwinden muss

$$(\Delta F)_{\psi_0} = \sqrt{\langle (F - \langle F \rangle)^2 \rangle_{\psi_0}} = 0. \quad (9.200)$$

Der Index ψ_0 soll daran erinnern, dass diese Beziehung für ein Teilchen im Zustand ψ_0 gilt, denn es hängt vom Zustand ab, ob der Erwartungswert einer Observable einen scharfen Wert annimmt oder nicht.

Wir werden nun zeigen, dass sich mit Hilfe des Operatorformalismus eine einfache Bedingung angeben lässt, die erfüllt sein muss, damit der Erwartungswert $\langle F \rangle_{\psi_0}$ einer Observable F im Zustand ψ_0 einen scharfen Wert besitzt. Wir betrachten diese Observable als Funktion $F(x, p)$ oder allgemeiner als Funktion $F(q_k, p_k)$ der verallgemeinerten Koordinaten q_k und der dazu kanonisch konjugierten Impulse p_k . Wir betrachten hier stationäre (zeitunabhängige) Zustände und interpretieren die Bildung der Erwartungswerte als Mittelung vieler Messungen an identischen, gleich präparierten Teilchen.

Satz 9.1 Sei der Zustand jedes betrachteten Teilchens beschrieben durch die Wellenfunktion $\psi_0(x)$ im Ortsraum, dann gilt: Der Erwartungswert $\langle F(x, p) \rangle_{\psi_0}$ einer Observable $F(x, p)$ nimmt genau dann den scharfen Wert F_0 an, wenn die Wellenfunktion $\psi_0(x)$ die folgende Gleichung erfüllt

$$\hat{F}\psi_0(x) = F_0\psi_0(x). \quad (9.201)$$

Die Gleichung (9.201) wird als **Eigenwertgleichung** bezeichnet. Sie besagt, dass sich die Wellenfunktion $\psi_0(x)$ bis auf den Faktor F_0 reproduziert, wenn man den Operator \hat{F} auf sie anwendet. Eine Wellenfunktion ψ_0 , die (9.201) erfüllt, ist eine **Eigenfunktion** des Operators \hat{F} . Der scharfe Wert F_0 , den der Erwartungswert $\langle F(x, p) \rangle_{\psi_0}$ annimmt, wird **Eigenwert** des Operators \hat{F} genannt.

In der Impulsraumdarstellung gilt ein entsprechender Satz für die Wellenfunktion $\phi(p)$. Es ist zu beachten, dass der Operator \hat{F} in dieser Darstellung

eine andere Form besitzt als in der Ortsraumdarstellung.

Beweis des Satzes:

Nach der Definition 9.13 für den scharfen Wert des Erwartungswerts $\langle F(x, p) \rangle_{\psi_0}$ einer Observable $F(x, p)$ ist folgende Äquivalenz zu zeigen

$$\hat{F}\psi_0(x) = F_0\psi_0(x) \Leftrightarrow (\Delta F)_{\psi_0} = 0, \quad (9.202)$$

wobei $F_0 = \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0}$. Wir betrachten die beiden Richtungen einzeln.

„ \Rightarrow “

Mit Hilfe der Eigenwertgleichung (9.201) folgt für den Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \hat{F} \psi_0(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) F_0 \psi_0(x) dx \\ &= F_0 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \psi_0(x) dx}_{=1} &= F_0. \end{aligned} \quad (9.203)$$

Für den Erwartungswert $\langle F^2(x, p) \rangle_{\psi_0}$ von $F^2(x, p)$ ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle F^2(x, p) \rangle_{\psi_0} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \hat{F}^2 \psi_0(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \hat{F} (\hat{F} \psi_0(x)) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \hat{F} F_0 \psi_0(x) dx &= F_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \hat{F} \psi_0(x) dx \\ &= F_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) F_0 \psi_0(x) dx &= F_0^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \psi_0(x) dx}_{=1} \\ &= F_0^2. \end{aligned} \quad (9.204)$$

Somit erhalten wir für die Unschärfe $(\Delta F)_{\psi_0}$ von $F(x, p)$

$$\begin{aligned} (\Delta F)_{\psi_0} &= \sqrt{\langle (F(x, p) - \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0})^2 \rangle_{\psi_0}} \\ &= \sqrt{\langle F^2(x, p) \rangle_{\psi_0} - \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0}^2} \\ &= \sqrt{F_0^2 - F_0^2} = 0. \end{aligned} \quad (9.205)$$

„ \Leftarrow “

Aus $(\Delta F)_{\psi_0} = 0$ folgt mit der Eigenschaft, dass in der Quantenmechanik die Operatoren hermitesch sind

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0} \right)^2 \psi_0(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*(x) \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0} \right) \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0} \right) \psi_0(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0} \right) \psi_0(x) \right)^* \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0} \right) \psi_0(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left| \left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0} \right) \psi_0(x) \right|^2 dx. \end{aligned} \quad (9.206)$$

Dieses Integral verschwindet nur dann, wenn gilt

$$\left(\hat{F} - \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0}\right) \psi_0(x) = 0, \quad (9.207)$$

d.h. wenn folgende Gleichung erfüllt ist

$$\hat{F}\psi_0(x) = F_0\psi_0(x) \text{ mit } F_0 = \langle F(x, p) \rangle_{\psi_0}. \quad (9.208)$$

□

Wir fassen diesen Abschnitt zusammen:

Genau dann wenn bei wiederholter Messung der Observablen $F(x, p)$ an identischen, im selben Zustand ψ_0 präparierten Teilchen, immer der selbe Wert F_0 gemessen wird, ist ψ_0 eine Eigenfunktion des Operators \hat{F} zum Eigenwert F_0 . Man sagt dann, das Teilchen befindet sich in einem Eigenzustand des Operators \hat{F} der zum Eigenwert F_0 gehört.

9.5.2 Eigenfunktionen und Eigenwerte von ausgewählten Operatoren

Wir betrachten hier verschiedene Operatoren, die wir in Abschnitt 9.3.2 kennengelernt haben und bestimmen ihre Eigenfunktionen und Eigenwerte.

Eigenfunktionen und Eigenwerte des Hamiltonoperators

Wir betrachten ein Teilchen, das sich in einem zeitunabhängigen Potential $V(x, y, z)$ bewegt. Seine Gesamtenergie E ist dann konstant und damit scharf messbar, wenn sich das Teilchen in einem Eigenzustand des Operators befindet. Nach Abschnitt 9.5.1 ist somit E ein Eigenwert des Hamiltonoperators \hat{H} . Die Eigenwertgleichung lautet

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (9.209)$$

Andererseits gilt die Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (9.210)$$

Aus (9.209) und (9.210) folgt die Gleichung

$$E\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (9.211)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi(x, y, z, t) = u(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.212)$$

Andererseits kann die zeitunabhängige Schrödingergleichung (9.108) als Eigenwertgleichung aufgefasst werden, indem wir schreiben

$$\underbrace{\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x, y, z)\right)}_{=\hat{H}} u(x, y, z) = Eu(x, y, z). \quad (9.213)$$

Wir halten fest

- Die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators (9.212) stellen stationäre Zustände dar.
- Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung (9.108) kann als Eigenwertgleichung aufgefasst werden.
- Insbesondere sind die Wellenfunktionen $u(x, y, z)$ Eigenfunktionen des Hamiltonoperators.

Das Teilchen im Potentialtopf (vgl. Abschnitte 9.1.1 und 9.4.2) ist ein instruktives Beispiel für das Auftreten diskreter Energiewerte E_n . Zu jedem Eigenwert E_n des Hamiltonoperators gehört eine Eigenfunktion $\psi_n(x, t)$ bzw. $u_n(x)$.

Eigenfunktionen und Eigenwerte des Impulsoperators

Wir betrachten einfachheitshalber ein eindimensionales System. Die Eigenwertgleichung lautet

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = p_0 \psi(x, t) \quad (9.214)$$

mit der allgemeinen Lösung

$$\psi(x, t) = f(t) e^{ip_0 x / \hbar}, \quad (9.215)$$

wobei $f(t)$ als Amplitude aufzufassen ist. Diese Funktion ist räumlich periodisch und stellt ein Teilchen dar, das einen scharf bestimmten Impuls p_0 hat, dessen Position aber völlig unbestimmt ist. Damit ist die Unschärfe des Ortes unendlich gross. Dies ist im Einklang mit der Heisenbergschen Unschärferelation (9.37).

Eigenfunktionen und Eigenwerte des Ortsoperators

Wir beschränken uns wiederum auf eine Dimension und betrachten zusätzlich ein zeitunabhängiges Problem. Die Eigenwertgleichung nimmt dann folgende Form an

$$\hat{x} \psi(x) = x_0 \psi(x). \quad (9.216)$$

Der Ortsoperator in der Ortsraumdarstellung entspricht dem Faktor x . Demzufolge können wir schreiben

$$(x - x_0) \psi(x) = 0. \quad (9.217)$$

Nach dieser Gleichung muss $\psi(x)$ verschwinden für alle $x \neq x_0$. Bei $x = x_0$ ist $\psi(x)$ unendlich und zwar so, dass

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1. \quad (9.218)$$

D.h. $\psi(x)$ entspricht einer sogenannten *Diracschen Deltafunktion*

$$\psi(x) = \delta(x - x_0). \quad (9.219)$$

Eine solche Deltafunktion kann man angenähert als unendlich schmales Gausssches Wellenpaket beschreiben

$$\psi(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{a\sqrt{2\pi}}} e^{-(x-x_0)^2/(4a^2)}. \quad (9.220)$$

Eigenfunktionen und Eigenwerte des Operators \hat{L}_z

Der Zustand eines Teilchens im dreidimensionalen Raum sei in Polarkoordinaten ausgedrückt $\psi(r, \vartheta, \varphi)$. Wir betrachten hier wiederum ein zeitunabhängiges Problem. Somit lautet die Eigenwertgleichung für den Operator \hat{L}_z

$$\hat{L}_z \psi(r, \vartheta, \varphi) = L_{z0} \psi(r, \vartheta, \varphi). \quad (9.221)$$

Mit (9.68) ergibt sich

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \vartheta, \varphi) = L_{z0} \psi(r, \vartheta, \varphi). \quad (9.222)$$

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = f(r, \vartheta) e^{iL_{z0}\varphi/\hbar}. \quad (9.223)$$

Das erste Postulat (siehe Abschnitt 9.1) verlangt, dass die Wellenfunktion eindeutig sein muss. Daraus ergibt sich für die Wellenfunktion $\psi(r, \vartheta, \varphi)$ folgende notwendige Bedingung

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = \psi(r, \vartheta, \varphi + 2\pi). \quad (9.224)$$

D.h. es muss gelten

$$e^{iL_{z0}\varphi/\hbar} = e^{iL_{z0}(\varphi+2\pi)/\hbar}. \quad (9.225)$$

Diese Gleichung ist erfüllt, wenn

$$\frac{L_{z0}2\pi}{\hbar} = 2\pi m_l \text{ mit } m_l \in \mathbb{Z}. \quad (9.226)$$

Damit ergibt sich

Die Eigenwerte L_{z0} des Operators \hat{L}_z sind ganzzahlige Vielfache von \hbar

$$L_{z0} = m_l \hbar \text{ mit } m_l \in \mathbb{Z}. \quad (9.227)$$

Zu jedem Eigenwert (zu jeder Quantenzahl) $m_l \hbar$ gehört eine Eigenfunktion $\psi_{m_l}(r, \vartheta, \varphi)$

$$\psi_{m_l}(r, \vartheta, \varphi) = f_{m_l}(r, \vartheta) e^{im_l\varphi}. \quad (9.228)$$

Aus diesen Betrachtungen ergibt sich, dass die z-Komponente des Drehimpulses - wenn sie einen scharfen Wert besitzt - nur die diskreten Werte $m_l \hbar$ annehmen kann. Dies gilt nur für eine ausgezeichnete Richtung des Raumes, in diesem Fall die z-Richtung. Entlang der beiden dazu orthogonalen Raumrichtungen, x und y , ist der Drehimpuls unscharf. Diese Tatsache werden wir in einem späteren Kapitel noch genauer diskutieren.

9.5.3 Das dritte Postulat: Die quantenmechanische Messung

Das dritte Postulat der Quantenmechanik lautet:

Postulat 3 *Das Ergebnis einer einzelnen Messung einer Observablen F ist ein Eigenwert des zugehörigen Operators \hat{F} . Erhält man bei einer Messung den Eigenwert F_0 , so geht die Wellenfunktion in die entsprechende Eigenfunktion ψ_0 über. D.h. befindet sich das System vor der Messung einer Observablen F nicht in einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} , so ändert die Messung den Zustand des System, sodass sich das System nach der Messung in einem Eigenzustand des Operators \hat{F} befindet. Hingegen bleibt der Zustand des Systems unverändert, wenn dieser bereits vor der Messung der Observablen F einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} entspricht.*

Wir illustrieren Postulat 3 am Beispiel des Drehimpulses aus dem vorangegangenen Abschnitt. Wir betrachten die Messung der Komponente des Drehimpulses eines Teilchens längs einer vorgegebenen Achse. Eine solche ausgezeichnete Achse kann zum Beispiel durch die Richtung eines angelegten homogenen Magnetfeldes vorgegeben sein, eine Situation die wir im Kontext des Zeeman-Effekts noch genauer diskutieren werden. Es ist in der Quantenmechanik üblich, diese Achse, längs der die Komponente des Drehimpulses gemessen wird, als z-Achse zu bezeichnen.

Als Ergebnis einer solchen Messung der z-Komponente des Drehimpulses L_z ergeben sich nach Postulat 3 und Abschnitt 9.5.2 nur die diskreten Werte $m_l \hbar$, d.h. die Eigenwerte des entsprechenden Operators \hat{L}_z . Führt man diese Messung nun an gleich präparierten Teilchen durch und misst jedes Mal den selben Wert (Eigenwert) $m_l \hbar$, dann war der Zustand der Teilchen vor der Messung ein Eigenzustand von \hat{L}_z und der Zustand der Teilchen wird durch die Messung nicht verändert. Misst man hingegen an gleich präparierten Teilchen verschiedene Werte (Eigenwerte) $m_l \hbar$, dann war der Zustand der Teilchen vor der Messung kein Eigenzustand von \hat{L}_z . Nach der Messung befinden sich in diesem Fall die Teilchen in verschiedenen Eigenzuständen von \hat{L}_z zu den entsprechenden Eigenwerten (Messresultaten) $m_l \hbar$.

9.5.4 Simultane Eigenfunktionen zweier Operatoren

Nach Satz 9.1 nimmt der Erwartungswert $\langle F(x, p) \rangle_{\psi_0}$ einer Observable $F(x, p)$ den scharfen Wert F_0 an, wenn der Zustand des Teilchens ψ_0 die Eigenwertgleichung

chung

$$\hat{F}\psi_0 = F_0\psi_0 \quad (9.229)$$

erfüllt. Es stellt sich nun die Frage, ob Zustände ψ existieren, für die die Erwartungswerte von zwei Observablen gleichzeitig scharf sind. Diese Frage ist mit „ja“ zu beantworten, wie das folgende Beispiel zeigt.

Die Wellenfunktion

$$\psi(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar} \quad (9.230)$$

stellt ein Teilchen dar, das sich im zeitlich und räumlich konstanten Potential längs der x-Achse bewegt. Nach Abschnitt 9.5.1 sind die Energie E und auch der Impuls p gleichzeitig scharf. Dies lässt sich nochmals verdeutlichen, indem wir die Wellenfunktion $\psi(x, t)$ als Produkt schreiben

$$\psi(x, t) = Ae^{ipx/\hbar}e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.231)$$

Daraus wird ersichtlich, dass es sich um eine simultane Eigenfunktion der Operatoren \hat{p}_x und \hat{H} handelt. Denn eine Eigenfunktion von \hat{p}_x hat nach (9.215) die allgemeine Form

$$\psi(x, t) = f(t)e^{ipx/\hbar} \quad (9.232)$$

und eine Eigenfunktion von \hat{H} hat nach (9.212) die allgemeine Form

$$\psi(x, t) = u(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (9.233)$$

Das Ziel ist es nun ein allgemeines Kriterium zu formulieren, welches angibt, ob zwei Observable gleichzeitig scharf messbar sind. Im Zusammenhang mit der Erklärung der Bedeutung des Kommutators (siehe Abschnitt 9.3.3) haben wir diese Frage schon einmal gestreift, indem wir gesagt haben, dass die Erwartungswerte nicht kommutierender Operatoren gleichzeitig nicht mit beliebiger Genauigkeit bestimmt werden können. Wie angekündigt wollen wir nun diese Aussage präziser formulieren und beweisen. Es gilt der folgende Satz:

Satz 9.2 *Die Erwartungswerte von zwei Observablen F und G eines Teilchens im Zustand ψ sind dann und nur dann gleichzeitig scharf, wenn die Anwendung des Kommutators der entsprechenden Operatoren \hat{F} und \hat{G} auf die Wellenfunktion ψ null ergibt*

$$[\hat{F}, \hat{G}]\psi = 0. \quad (9.234)$$

Beweis:

Wir betrachten die beiden Richtungen einzeln.

„ \Rightarrow “

Wenn F und G gleichzeitig scharf sind, dann gelten nach Satz 9.1 die Eigenwertgleichungen

$$\hat{F}\psi = F_0\psi, \quad (9.235)$$

$$\hat{G}\psi = G_0\psi. \quad (9.236)$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} [\hat{F}, \hat{G}]\psi &= \hat{F}\hat{G}\psi - \hat{G}\hat{F}\psi = \hat{F}(\hat{G}\psi) - \hat{G}(\hat{F}\psi) \\ &= \hat{F}(G_0\psi) - \hat{G}(F_0\psi) = G_0\hat{F}\psi - F_0\hat{G}\psi \\ &= G_0F_0\psi - F_0G_0\psi = 0. \end{aligned} \quad (9.237)$$

„ \Leftarrow “

Zu zeigen ist, dass wenn die Anwendung des Kommutators $[\hat{F}, \hat{G}]$ auf die Wellenfunktion ψ null ergibt, ψ eine Eigenfunktion von \hat{F} und \hat{G} ist.⁶

Es sei (ohne Beschränkung der Allgemeinheit) ψ eine Eigenfunktion von \hat{F} , dann gilt

$$\hat{F}\psi = F_0\psi. \quad (9.238)$$

Da $[\hat{F}, \hat{G}]\psi = 0$ gilt

$$\hat{F}\hat{G}\psi = \hat{G}\hat{F}\psi. \quad (9.239)$$

Mit (9.238) erhalten wir

$$\hat{F}(\hat{G}\psi) = F_0(\hat{G}\psi). \quad (9.240)$$

Da ψ die einzige Eigenfunktion von \hat{F} zum Eigenwert F_0 ist, muss $\hat{G}\psi$ proportional zu ψ sein. Wir bezeichnen die Proportionalitätskonstante mit G_0 und erhalten

$$\hat{G}\psi = G_0\psi, \quad (9.241)$$

d.h. ψ ist gleichzeitig auch eine Eigenfunktion von \hat{G} . Für den Beweis des entarteten Falls verweisen wir auf weiterführende Literatur [10].

□

Beispiele zur Anwendung des Satzes

- Nach Abschnitt 9.3.3 kommutieren \hat{x} und \hat{p}_x für jede beliebige Wellenfunktion ψ nicht. Demzufolge gibt es nach Satz 9.2 keinen Zustand, bei dem x und p_x gleichzeitig scharf sind. Dies ist in Übereinstimmung mit der Unschärferelation (9.37).
- Die Operatoren der Drehimpulskomponenten kommutieren nicht (siehe Abschnitt 9.3.3). Demzufolge gibt es nach Satz 9.2 auch für diese Observablen keinen Zustand, bei dem sie gleichzeitig scharf sind.

⁶Wir beschränken uns dabei auf den nicht-entarteten Fall, d.h. wenn zu einem Eigenwert ein eindimensionaler Eigenraum gehört.

- Weitere Beispiele für gleichzeitig scharfe Observable werden wir bei der Lösung der Schrödinger-Gleichung des Wasserstoffatoms (siehe Kapitel 11) kennenlernen. In diesem Fall sind dann sogar drei Observablen scharf: Die Energie E , das Quadrat des Drehimpulsvektors \vec{L}^2 und die z-Komponente L_z des Drehimpulses. Entsprechend gilt nach Satz 9.2

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}_z] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0. \quad (9.242)$$

9.5.5 Orthogonalität der Eigenfunktionen

Die allgemeine mathematische Definition für die Orthogonalität zweier Funktionen lautet:

Definition 9.14 Zwei Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ nennt man im Variablenbereich $a \leq x \leq b$ **orthogonal**, wenn gilt

$$\int_a^b f^*(x)g(x)dx = 0. \quad (9.243)$$

Zum Beispiel sind die Funktionen $\cos(mx)$ und $\cos(nx)$ bei ganzzahligen m und n im Variablenbereich $-\pi \leq x \leq \pi$ orthogonal für $m \neq n$, denn es gilt

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos(mx) \cos(nx) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ \pi, & m = n. \end{cases} \quad (9.244)$$

Die gleiche Orthogonalitätsbedingung erfüllen auch die Funktionen $\sin(mx)$ und $\sin(nx)$. Es sind genau diese Orthogonalitätseigenschaften, die die Fourier-Entwicklung ermöglichen.

Für die Wellenfunktionen ψ gilt der folgende Satz:

Satz 9.3 Es seien ψ_m und ψ_n Eigenfunktionen des hermiteschen Operators \hat{F} , die zu verschiedenen Eigenwerten F_m und F_n gehören. Dann sind ψ_m und ψ_n orthogonal in ihrem räumlichen Existenzgebiet, d.h.

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = 0 \text{ für } m \neq n. \quad (9.245)$$

Beweis:

- i) Hermitesche Operatoren \hat{F} erfüllen die Bedingung (9.90)

$$\int \psi^* \hat{F} \psi dx = \int \psi \hat{F}^* \psi^* dx \quad (9.246)$$

Wir beweisen nun in einem ersten Schritt, dass dann auch gilt

$$\int \psi_m^* \hat{F} \psi_n dx = \int \psi_n \hat{F}^* \psi_m^* dx. \quad (9.247)$$

Es sei $\psi = \psi_m + \beta\psi_n$, wobei $\beta \in \mathbb{C}$ beliebig. Für diese Wellenfunktion gilt nach (9.246)

$$\int (\psi_m + \beta\psi_n)^* \hat{F}(\psi_m + \beta\psi_n) dx = \int (\psi_m + \beta\psi_n) \hat{F}^* (\psi_m + \beta\psi_n)^* dx. \quad (9.248)$$

Ausmultiplizieren liefert

$$\begin{aligned} & \int \psi_m^* \hat{F} \psi_m dx + \beta \int \psi_m^* \hat{F} \psi_n dx \\ & + \beta^* \int \psi_n^* \hat{F} \psi_m dx + \beta^* \beta \int \psi_n^* \hat{F} \psi_n dx \\ & = \int \psi_m \hat{F}^* \psi_m^* dx + \beta^* \int \psi_m \hat{F}^* \psi_n^* dx \\ & + \beta \int \psi_n \hat{F}^* \psi_m^* dx + \beta \beta^* \int \psi_n \hat{F}^* \psi_n^* dx \end{aligned} \quad (9.249)$$

Indem wir wiederum die Bedingung (9.246) für hermitesche Operatoren ausnützen, lassen sich einige Terme wegekürzen und wir erhalten

$$\beta \underbrace{\left(\int \psi_m^* \hat{F} \psi_n dx - \int \psi_n \hat{F}^* \psi_m^* dx \right)}_{\equiv \alpha} = \beta^* \underbrace{\left(\int \psi_m \hat{F}^* \psi_n^* dx - \int \psi_n^* \hat{F} \psi_m dx \right)}_{\equiv \gamma}. \quad (9.250)$$

Mit den Bezeichnungen α und γ können wir (9.250) schreiben

$$\beta\alpha = \beta^*\gamma. \quad (9.251)$$

Für $\beta \in \mathbb{C}$ dürfen wir einen beliebigen Wert annehmen. Wir wählen einmal $\beta = 1$ und einmal $\beta = i$ und erhalten damit die Gleichungen $\alpha = \gamma$ und $\alpha = -\gamma$ mit der Lösung $\alpha = 0$ und $\gamma = 0$, d.h.

$$\int \psi_m^* \hat{F} \psi_n dx - \int \psi_n \hat{F}^* \psi_m^* dx = 0, \quad (9.252)$$

$$\int \psi_m \hat{F}^* \psi_n^* dx - \int \psi_n^* \hat{F} \psi_m dx = 0. \quad (9.253)$$

Jede dieser Gleichungen ist äquivalent zu (9.247), womit die Richtigkeit von (9.247) bewiesen ist.

- ii) Betrachte nun zwei Eigenfunktionen ψ_m und ψ_n von \hat{F} , die zu den (reellen) Eigenwerten F_m und F_n gehören. Die entsprechenden Eigenwertgleichungen lauten dann

$$\hat{F}\psi_m = F_m\psi_m, \quad (9.254)$$

$$\hat{F}\psi_n = F_n\psi_n. \quad (9.255)$$

Einsetzen in (9.247) liefert

$$F_n \int \psi_m^* \psi_n dx - F_m \int \psi_n \psi_m^* dx = (F_n - F_m) \int \psi_m^* \psi_n dx = 0, \quad (9.256)$$

d.h. für $F_m \neq F_n$ gilt

$$\int \psi_m^* \psi_n dx = 0. \quad (9.257)$$

□

Wir illustrieren Satz 9.3 an zwei bekannten Beispielen:

1. Teilchen im Potentialtopf

Die Orthogonalität der Eigenfunktionen des Hamiltonoperators für ein Teilchen im (unendlichen) Potentialtopf ist für $x < 0$ und $x > L$ offensichtlich. Wir zeigen nun, dass die Orthogonalitätsbedingung auch für $0 \leq x \leq L$ erfüllt ist. Nach Abschnitt 9.4.2 nehmen die Eigenfunktionen folgende Form an

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (9.258)$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} \int_0^L \psi_m^*(x, t) \psi_n(x, t) dx &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= \frac{2}{L} \int_0^L \frac{e^{im\pi x/L} - e^{-im\pi x/L}}{2i} \frac{e^{in\pi x/L} - e^{-in\pi x/L}}{2i} dx \\ &= -\frac{2}{L} \int_0^L e^{i(m+n)\pi x/L} + e^{-i(m+n)\pi x/L} \\ &\quad - e^{i(m-n)\pi x/L} - e^{-i(m-n)\pi x/L} dx \end{aligned} \quad (9.259)$$

Das Integral über die ersten beiden Summanden verschwindet. Für das Integral über die letzten beiden Summanden müssen wir eine Fallunterscheidung machen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \int_0^L \psi_m^*(x, t) \psi_n(x, t) dx &= \frac{2}{L} \int_0^L e^{i(m-n)\pi x/L} + e^{-i(m-n)\pi x/L} dx \\ &= \begin{cases} 0, & m \neq n, \\ 1, & m = n. \end{cases} \end{aligned} \quad (9.260)$$

2. Die Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators (z-Komponente)

Nach Abschnitt 9.5.2 haben die Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators \hat{L}_z folgende Form

$$\psi_{m_l}(r, \vartheta, \varphi) = f_{m_l}(r, \vartheta) e^{im_l \varphi} \quad \text{mit } m_l \in \mathbb{Z}, \quad (9.261)$$

wobei zu jedem m_l ein Eigenwert $L_{z0} = m_l \hbar$ gehört. Dies ist eine Produktwellenfunktion, bei der die Variable φ von den Variablen r und ϑ separiert ist. Sowohl das System der Funktionen $e^{im_l \varphi}$, als auch das System der Funktionen $f_{m_l}(r, \vartheta)$ muss Orthogonalitätseigenschaften haben. Näheres folgt im Kapitel 11 über das Wasserstoffatom. Die Funktionen $f_{m_l}(r, \vartheta)$ hängen vom betrachteten System ab. Für das System der Funktionen $e^{im_l \varphi}$ lässt sich die Orthogonalitätseigenschaft leicht überprüfen

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} (e^{im_l \varphi})^* e^{im'_l \varphi} d\varphi &= \int_0^{2\pi} e^{i(m'_l - m_l)\varphi} d\varphi \\ &= \begin{cases} 0, & m_l \neq m'_l, \\ 2\pi, & m_l = m'_l. \end{cases} \end{aligned} \quad (9.262)$$

Entartung

Häufig gehören zu einem Eigenwert F_m eines Operators \hat{F} mehrere verschiedene Eigenfunktionen. In diesem Fall spricht man von *Entartung*.

Zum Beispiel sind die Eigenfunktionen $\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z, t)$ des Hamiltonoperators eines in einem Würfel eingespernten Teilchens entartet

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z, t) = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{L}\right) e^{-iE_{n_1, n_2, n_3} t / \hbar} \quad (9.263)$$

mit den Eigenwerten

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (9.264)$$

Entartet sind dabei sicher alle Energieniveaus bei denen mindestens zwei der Quantenzahlen n_1 , n_2 und n_3 verschieden sind. Aus dem Beweis des Satzes 9.3 geht hervor, dass zwei verschiedene Eigenfunktionen, die zum selben Eigenwert gehören nicht notwendigerweise orthogonal sind. Deshalb ist Satz 9.3 im Fall der Entartung mit Vorsicht anzuwenden. Wir werden auf diese Thematik der Entartung im nächsten Abschnitt nochmals genauer eingehen.

9.5.6 Linearkombinationen von Eigenfunktionen

Linearkombinationen zum selben Eigenwert

Für Eigenfunktionen zum selben Eigenwert, d.h. im Fall der Entartung, gilt der folgende Satz:

Satz 9.4 Eine Linearkombination von Eigenfunktionen des Operators \hat{F} zum selben Eigenwert F_0 ist wieder eine Eigenfunktion des Operators \hat{F} zum selben Eigenwert F_0 .

Beweis:

Seien ψ_i , $i = 1, 2, \dots, n$, Eigenfunktionen des Operators \hat{F} zum selben Eigenwert F_0 , dann gilt

$$\hat{F}\psi_i = F_0\psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (9.265)$$

Für eine Linearkombination dieser Eigenfunktionen $\psi = \sum_{i=1}^n c_i\psi_i$, $c_i \in \mathbb{C}$ erhalten wir

$$\hat{F}\psi = \hat{F} \sum_{i=1}^n c_i\psi_i = \sum_{i=1}^n c_i\hat{F}\psi_i = \sum_{i=1}^n c_iF_0\psi_i = F_0 \sum_{i=1}^n c_i\psi_i = F_0\psi \quad (9.266)$$

□

Im letzten Abschnitt haben wir gesehen, dass Eigenfunktionen zum selben Eigenwert nicht notwendigerweise orthogonal sind. Im Allgemeinen ist es jedoch sehr hilfreich mit orthogonalen Eigenfunktionen rechnen zu können. Nach Satz 9.4 ist es nun möglich aus Eigenfunktionen ψ_i , $i = 1, 2, \dots, n$, zum selben Eigenwert F_0 eines Operators \hat{F} neue Eigenfunktionen Ψ_i , $i = 1, 2, \dots, n$, zum selben Eigenwert F_0 zu bilden, welche orthogonal sind. Eine Methode, die es ermöglicht aus ursprünglich nicht orthogonalen Eigenfunktionen ψ_i , $i = 1, 2, \dots, n$, orthogonale Eigenfunktionen Ψ_i , $i = 1, 2, \dots, n$, zu gewinnen, ist das sogenannte *Gram-Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren*. Die neuen orthogonalen Eigenfunktionen Ψ_i , $i = 1, 2, \dots, n$, ergeben sich dabei folgendermassen (für einen Beweis verweisen wir auf die lineare Algebra)

$$\Psi_1 = \psi_1, \quad (9.267)$$

$$\Psi_2 = \psi_2 - \psi_1 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_2 dx, \quad (9.268)$$

$$\Psi_3 = \psi_3 - \psi_1 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_3 dx - \psi_2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \psi_3 dx, \quad (9.269)$$

⋮

$$\begin{aligned} \Psi_n &= \psi_n - \psi_1 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_n dx - \psi_2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^* \psi_n dx - \dots - \psi_{n-1} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_{n-1}^* \psi_n dx \\ &= \psi_n - \sum_{i=1}^{n-1} \psi_i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_n dx. \end{aligned} \quad (9.270)$$

Linearkombinationen zu unterschiedlichen Eigenwerten

Nachdem wir nun Linearkombinationen von Eigenfunktionen, die zum selben Eigenwert gehören, betrachtet haben, kommen wir nun zu Linearkombinationen von Eigenfunktionen zu unterschiedlichen Eigenwerten. Genauer gesagt, gehen wir der Frage nach, welche physikalische Bedeutung ein Zustand hat, der eine Linearkombination von Eigenfunktionen des Operators \hat{F} zu verschiedenen Eigenwerten ist.

Wir starten als Beispiel mit den Eigenfunktionen des Hamiltonoperators für ein Teilchen im Potentialtopf. Nach Abschnitt 9.4.2 lauten die Eigenfunktionen

$$\psi_n(x, t) = u_n(x)e^{-iE_n t/\hbar} \quad \text{für } 0 \leq x \leq L, \quad (9.271)$$

wobei

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad (9.272)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 n^2. \quad (9.273)$$

Wir bilden nun eine Linearkombination der Wellenfunktionen $\psi_n(x, t)$

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= c_1\psi_1(x, t) + c_2\psi_2(x, t) + \dots + c_n\psi_n(x, t) \\ &= c_1u_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2u_2(x)e^{-iE_2t/\hbar} + \dots + c_nu_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}. \end{aligned} \quad (9.274)$$

Jeder Summand von (9.274) ist eine Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (9.93). Dementsprechend ist nach dem Superpositionsprinzip (vgl. Abschnitt 9.4.1) auch die Linearkombination $\psi(x, t)$ eine Lösung und stellt damit einen Zustand dar, in dem sich das System befinden kann. Jedoch ist dieser Zustand nicht stationär, denn $\psi^*(x, t)\psi(x, t)$ ist zeitabhängig, da sich die Eigenwerte E_n nach Voraussetzung unterscheiden.

Wir kommen zu einer allgemeinen Betrachtung. Es sei F eine beliebige Observable und die Funktionen $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ orthogonale Eigenfunktionen des entsprechenden Operators \hat{F} , die zu den Eigenwerten F_1, F_2, \dots, F_n gehören, sodass die Eigenwertgleichungen $\hat{F}\psi_i = F_i\psi_i, i = 1, 2, \dots, n$, gelten. Wir betrachten eine beliebige Linearkombination der Eigenfunktionen

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n \quad (9.275)$$

und bestimmen den Erwartungswert der Observablen F , wenn sich das Teilchen im Zustand ψ befindet. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \langle F \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{F} \psi dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (c_1^*\psi_1^* + c_2^*\psi_2^* + \dots + c_n^*\psi_n^*) \hat{F} (c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (c_1^*\psi_1^* + c_2^*\psi_2^* + \dots + c_n^*\psi_n^*) (c_1\hat{F}\psi_1 + c_2\hat{F}\psi_2 + \dots + c_n\hat{F}\psi_n) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (c_1^*\psi_1^* + c_2^*\psi_2^* + \dots + c_n^*\psi_n^*) (c_1F_1\psi_1 + c_2F_2\psi_2 + \dots + c_nF_n\psi_n) dx \\ &= c_1^*c_1F_1 + c_2^*c_2F_2 + \dots + c_n^*c_nF_n, \end{aligned} \quad (9.276)$$

wobei wir im letzten Schritt die Normierung und die Orthogonalität der Eigenfunktionen $\psi_i, i = 1, 2, \dots, n$, benützt haben. Dieser Ausdruck führt zur folgenden Interpretation (vgl. Postulat 3):

Wenn sich ein Teilchen im Zustand $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \dots + c_n\psi_n$ befindet, der eine Linearkombination der orthogonalen Eigenfunktionen ψ_i des Operators \hat{F} mit den Eigenwerten F_i ist, dann ist die Wahrscheinlichkeit w_i , dass eine Messung der Observablen F den Wert F_i liefert, gegeben durch $w_i = c_i^*c_i$.

Diese Interpretation gilt auch bei Entartung, vorausgesetzt, dass die zu einem entarteten Eigenwert gehörenden Eigenfunktionen orthogonal sind. Die Konstruktion solcher orthogonaler Eigenfunktionen haben wir zu Beginn des Abschnitts skizziert (Gram-Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren).

9.5.7 Entwicklung nach Eigenfunktionen

Die Fourierreihe ist die Entwicklung einer periodischen Funktion nach einem speziellen orthogonalen Funktionensystem. Das analoge gilt für die Eigenfunktionen eines hermiteschen Operators:

Satz 9.5 Die Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ eines hermiteschen Operators \hat{F} bilden auch ein orthogonales Funktionensystem. Erfüllt dieses System die Vollständigkeitsrelation

$$\sum_i \psi_i^*(x', t) \psi_i(x, t) = \delta(x - x'), \quad (9.277)$$

so lässt sich jeder Zustand $\psi(x, t)$, in welchem sich das betrachtete quantenmechanische System befinden kann, als Linearkombination dieser Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ schreiben. Man spricht dann von einer Entwicklung der Wellenfunktion $\psi(x, t)$ nach den Eigenfunktionen $\psi_i(x, t)$ des Operators \hat{F} .

Beweis:

Es seien $\psi_i(x, t)$ Eigenfunktionen des Operators \hat{F} , welche die Vollständigkeitsrelation (9.277) erfüllen, dann gilt für einen beliebigen Zustand $\psi(x, t)$ des betrachteten quantenmechanischen Systems

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \psi(x', t) dx' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_i \psi_i^*(x', t) \psi_i(x, t) \psi(x', t) dx' \\ &= \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x', t) \psi(x', t) dx' \psi_i(x, t) \\ &= \sum_i c_i \psi_i(x, t) \quad \text{mit } c_i = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(x, t) \psi(x, t) dx. \end{aligned} \quad (9.278)$$

□

Zusammen mit der Interpretation aus dem letzten Abschnitt 9.5.6, lässt sich Postulat 3 folgendermassen präzisieren:

Das Ergebnis einer einzelnen Messung einer Observablen F ist ein Eigenwert des zugehörigen Operators \hat{F} . Erhält man bei einer Messung den Eigenwert F_0 , so geht die Wellenfunktion in die entsprechende Eigenfunktion ψ_0 über. D.h. befindet sich das System vor der Messung einer Observablen F nicht in einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} , so ändert die Messung den

Zustand des System, sodass sich das System nach der Messung in einem Eigenzustand des Operators \hat{F} befindet. Die Wahrscheinlichkeit w_i , welches Messresultat resultiert und damit welcher Eigenzustand das System nach der Messung einnimmt, ist bestimmt durch den Betrag der Koeffizienten c_i der Entwicklung des Zustands vor der Messung nach den Eigenfunktionen des Operators \hat{F} . Hingegen bleibt der Zustand des Systems unverändert, wenn dieser bereits vor der Messung der Observablen F einem Eigenzustand des entsprechenden Operators \hat{F} entspricht.

9.6 Verallgemeinerung auf Systeme mit vielen Freiheitsgraden

Der Formalismus, der hier am Beispiel der Bewegung eines einzelnen Teilchens (Massenpunkt) entwickelt wurde, gilt auch für Systeme mit beliebig vielen Freiheitsgraden. An die Stelle von x und p_x können auch die kanonisch konjugierten Variablen q_k und p_k treten. Außer Ort und Impuls eines Teilchens können Paare von konjugierten Variablen auch andere physikalische Größen beschreiben, wie zum Beispiel elektrische Ladung und magnetischer Fluss oder Teilchenzahl und Phase. Der Formalismus der Quantenmechanik gilt also sehr allgemein im Konfigurationsraum eines physikalischen Systems.

Literaturverzeichnis

- [1] F. Pedrotti, L. Pedrotti, W. Bausch, und H. Schmidt, *Optik für Ingenieure, Grundlagen*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2005.
- [2] A.H. Compton, Phys. Rev. **21**, 483 (1923).
- [3] http://www.satgeo.de/satgeo/quicklooks/methoden/fe_physik.htm, 27.10.2010.
- [4] <http://de.wikipedia.org/wiki/Sonne>, 27.10.2010.
- [5] <http://de.wikipedia.org/wiki/Sonnenradius>, 27.10.2010.
- [6] <http://de.wikipedia.org/wiki/Emissionsgrad>, 27.10.2010.
- [7] <http://www.periodensystem.info/download/>, 22.02.2011.
- [8] H. Haken, und H. Wolf, *Atom- und Quantenphysik, Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2004.
- [9] <http://www2.selu.edu/Academics/Faculty/delbers/emission-spectra-1.jpg>, 14.01.2011.
- [10] F. Schwabl, *Quantenmechanik (QM I), Eine Einführung*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2002.
- [11] A. Goldberg, H.M. Schey, und J.L. Schwartz, American Journal of Physics **35**, 177 (1967).
- [12] J. Jackson, *Klassische Elektrodynamik*, de Gruyter, Berlin, 2006.