T E I L 1

Einstieg in die Quantenmechanik

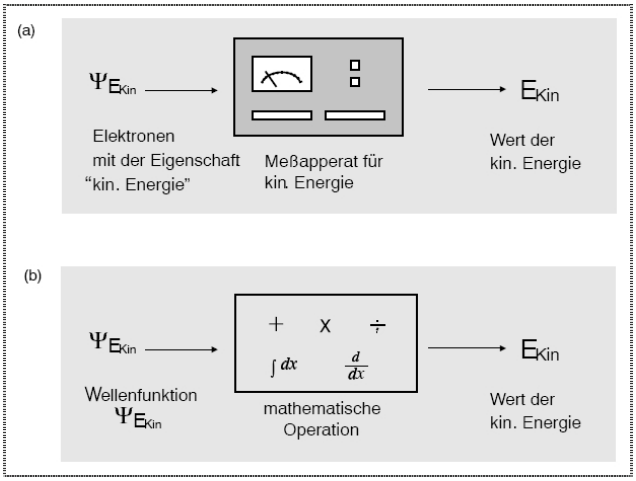
mit

Herleitung der Schrödinger- Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi_{E_{ges}}(x)}{dx^2}+V(x)\cdot\psi E_{ges}(x)=E_{ges}\cdot\psi_{E_{ges}}(x)$$

Diese Eigenwertgleichung für die Gesamtenergie ist eine der wichtigsten Gleichungen in der Quantenmechanik (QM). Sie hat in der QM eine Bedeutung, die mit der Newton'schen Gleichung in der klassischen Mechanik vergleichbar ist.

Analogie zwischen Messung und Anwendung eines Operators



Ein Operator ist die Anweisung, eine bestimmte mathematische Operation an der Wellenfunktion ψ durchzuführen. Dabei kann es sich um einfache Operationen handeln wie die Multiplikation mit einer Konstanten oder einer Funktion oder um eine eher komplizierte Operation wie die Differentiation.

Vorwort

Wenn man die Literatur zur Einführung in die Quantenmechanik verfolgt, ist regelmäßig festzustellen, dass die Schrödinger'sche Wellengleichung wie vom "Himmel gefallen" an den Anfang der quantenmechanischen Überlegungen gestellt wird. Dies erleichtert den Einstieg in diesen Teilbereich der Physik nicht gerade und man braucht sich nicht zu wundern, dass der nicht gerade leichte Umgang mit dieser mathematischen Systematik befremdlich bleibt. Wir wollen im folgenden versuchen, diese Grundgleichung, die in der modernen Physik nicht mehr wegzudenken ist, ein wenig von ihrem „Schrecken" zu nehmen.

Die Quantenmechanik (QM) ist leider *keine anschauliche* Theorie, weil die korrekte Beschreibung des beobachteten Verhaltens der Quantenobjekte nur mit einer gewissen mathematischen Abstraktheit erkauft werden kann. Dennoch bedeutet dies nicht, dass QM unverständlich bleiben muss, zumal der zugrundeliegende mathematische Formalismus sich aus der klassischen Wellenlehre ableiten lässt. Die hier vorgelegte Ausarbeitung hätte deutlich kürzer ausfallen können, jedoch wird ja gerade versucht, das Verständnis der im Elementarvereich herrschenden Gesetzmäßigkeiten zu erleichtern.

Um einen Einstieg in den elementaren Bereich der Quantenwelt zu finden, ist es nützlich, zuerst einige begriffliche Grundlagen zu klären. Dies tun wir im folgenden anhand verschiedener Experimente. Es ist uns bewusst, dass einige der hier aufgeführten Experimente jährlich von ganzen Heerscharen von Schülern und Studenten im Rahmen praktischer Übungen während des Physikunterrichts bzw. -studiums im Rahmen des normalen Lehrbetriebs bearbeitet werden.

Ich will hoffen, dass mit dieser Ausarbeitung im Teil I, die sich an das „Münchner Unterrichtskonzept zur QM" anlehnt, der Einstieg in die QM für die vielen jungen Menschen, die sich gerne mit Physik beschäftigen wollen, in verständlicher Weise gelingen wird.

Angaben zum Verfasser

Dipl. Ing. Martin Bock
Düppenweilerstraße 62
66763 Dillingen / Diefflen

Email: martin-bock@t-online.de

Homepage: http://www.physik-theologie.de

Diefflen, 13.08.2004

Dipl. Ing. Martin Bock

Verlagsrechte

Alle Rechte vorbehalten.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort 2

Kapitel I Physikalische Grundlagen 4

Kapitel 2 Herleitung der Schrödinger- Gleichung.....17

Kapitel I Physikalische Grundlagen

Statistische Aussagen der Quantentheorie

Wir beginnen unsere Überlegungen mit dem Doppelspaltexperiment. Sprüht man mit einer Farbsprühdose kleine Farbtröpfchen durch einen Doppelspalt -wobei die einzelnen Spalte nicht zu weit auseinander liegen dürfen- auf einen dahinter liegenden Papierschirm, ergibt sich ein Muster wie in Abb. 1 (a).

Doppeltspaltversuch mit Farbtröpfchen (klassische Teilchen)

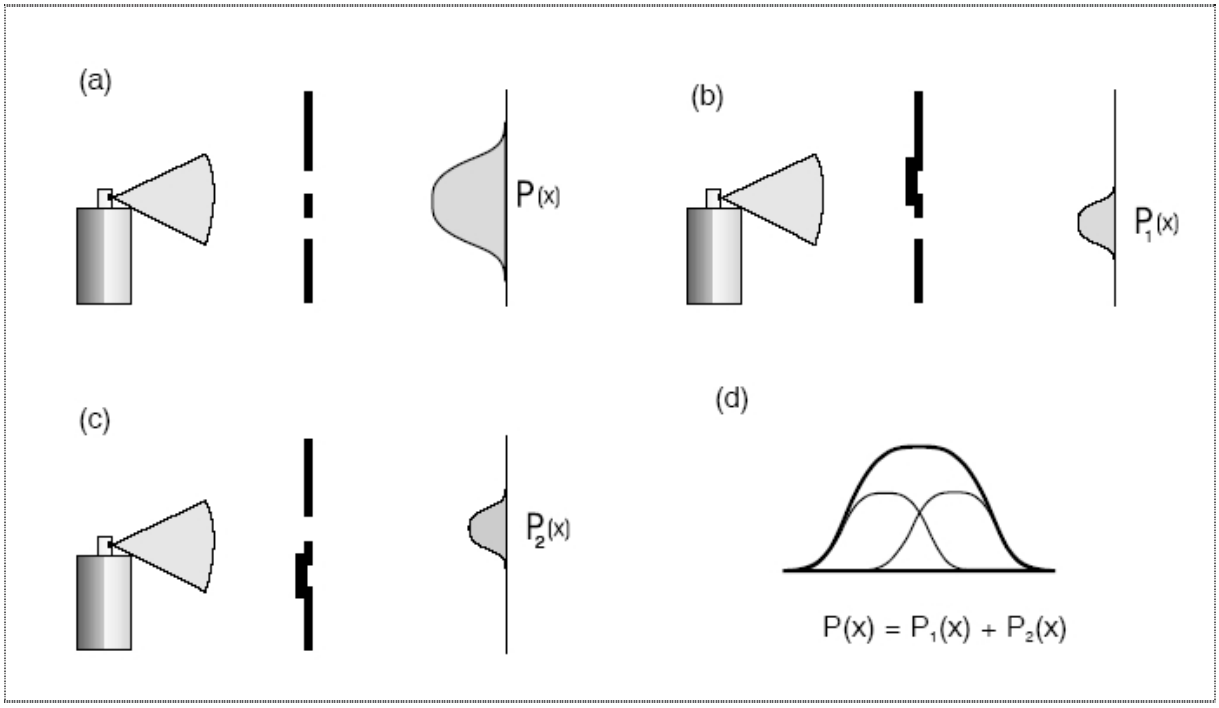


Abbildung 1

Die Intensität der Farbe auf dem Papier ist hinter den Spalten am größten und nimmt nach außen hin kontinuierlich und ohne auffällige Strukturen ab. Wir beschreiben die Verteilung der Farbintensität durch eine Funktion *P(x)*. Wird nun Spalt 2 abgedeckt, (Abb. 1 (b), so dass nur Farbtröpfchen von Spalt 1 auf das Papier gelangen, ergibt sich die Farbintensitätsverteilung $P_1(x)$. Danach wird der andere Spalt abgedeckt, so dass nur Farbe von Spalt 2 auf das Papier gelangt. Wir erhalten so die Verteilung $P_2(x)$ (Abb. 1 (c). Für die in den beiden Experimenten gewonnenen Farbintensitätsverteilungen *P(x)*, $P_1(x)$ und $P_2(x)$ gilt:

$$P(x) = P_1(x) + P_2(x) \qquad (1)$$

Für klassische Teilchen ist die beim Doppelspalt gewonnene Verteilung gleich der *Summe der beiden Einzelspaltverteilungen* (Abb. 1 (d)). Dies ist auch so bei Wasserwellen, die wir auf einem See beobachten können, wenn wir zwei Steine nicht zu weit voneinander entfernt ins Wasser werfen.

Ganz anders verläuft ein entsprechendes Experiment mit Quantenobjekten (z. B. mit Elektronen).

Doppelspaltversuch mit Elektronen

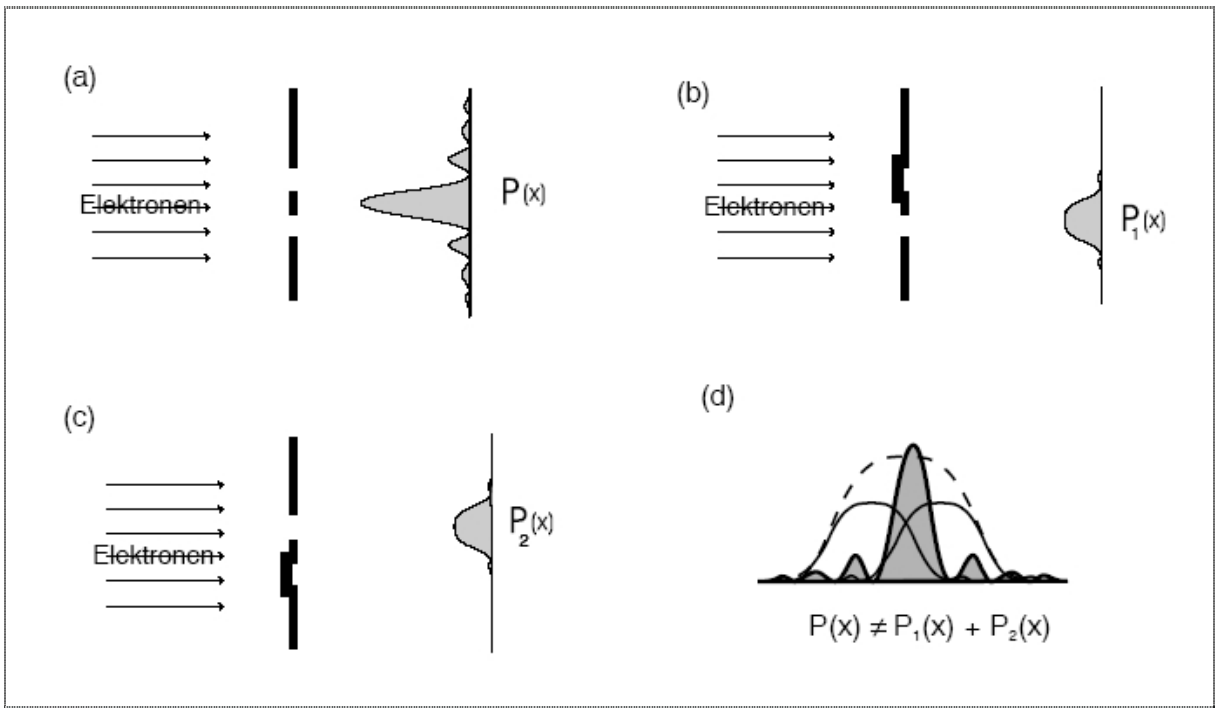


Abbildung 2

Bei zwei geöffneten Spalten ergibt sich ein charakteristisches Interferenzmuster.

(a) Elektronenbeugungsröhre, (b) Beugungsmuster auf dem Leuchtbildschirm

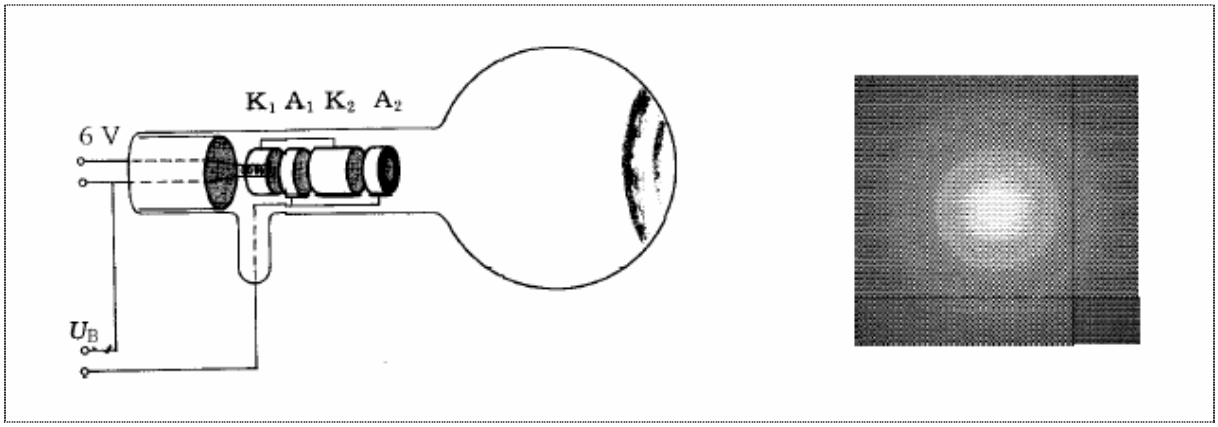


Abbildung 3

In einer Elektronenröhre (Abb. 3 (a)) emittiert die mit 6 V geheizte Kathode Elektronen. Diese durchlaufen eine Beschleunigungsspannung U_b= 5 KV. Sie werden von den nacheinander angeordneten Elektroden K1, K2 und A1 zu einem Elektronenstrahl gebündelt. In der durchbohrten Anode A2 durchquert der Strahl eine dünne

Folie aus polykristallinem Graphit. Auf dem Leuchtschirm erkennt man mehrere helle Ringe um den zentralen Fleck in der Mitte (Abb. 3 (b)). Die hellen Ringe werden durch Elektronenbeugung verursacht. Die Beugung erfolgt am Kristallgitter des Graphit. Dieses Beugungsphänomen ist ein starker Hinweis darauf, dass die Elektronen neben ihrem Teilchenverhalten auch Wellenverhalten zeigen. Beim Doppelspaltexperiment mit Elektronen ergibt sich folgendes Interferenzmuster.

Aufbau des Interferenzmusters beim Doppelspalt-Experiment

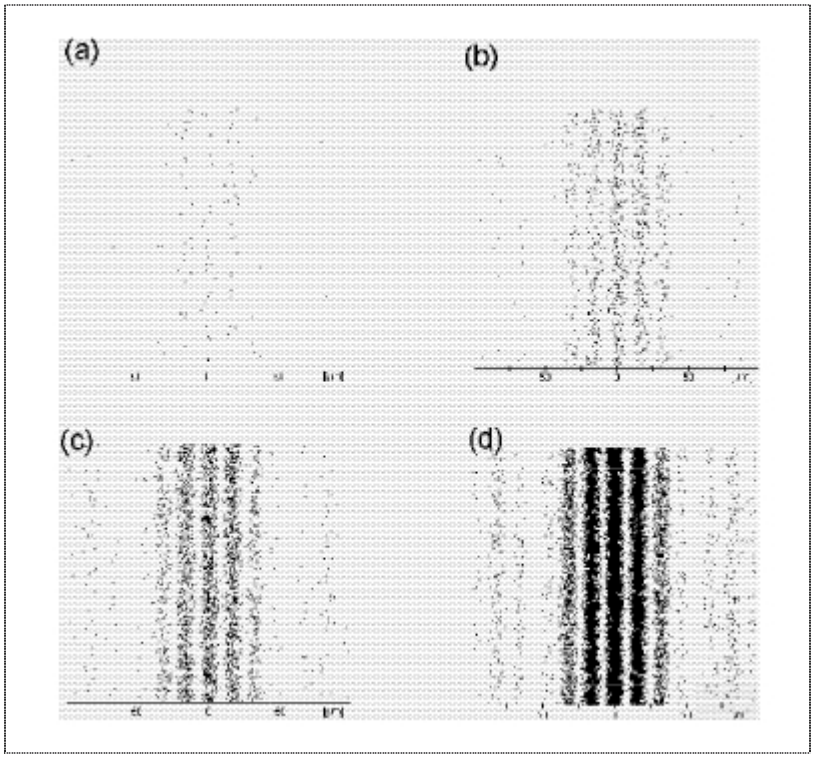


Abbildung 4

Die Intensitätsverteilung der Elektronen (s. Abb. 4 (d)) bezeichnen wir wieder mit *P(x)*. Nun wird Spalt 2 abgedeckt und wir erhalten die Elektronenverteilung $P_1(x)$, deren Maximum hinter Spalt 1 liegt (s. Abb. 2 (b)). Nun öffnen wir Spalt 2 und schließen Spalt 1. Alle Elektronen müssen jetzt durch Spalt 2. Es ergibt sich die Verteilung $P_2(x)$ (s. Abb. 2 (c)). Legt man die beiden Verteilungsmuster übereinander (Abb. 2 (d)), ergibt sich eine andere Verteilung, als bei zwei gleichzeitig geöffneten Spalten. Für Elektronen gilt

$$\boxed{P(x) \neq P_1(x) + P_2(x)} \qquad (2)$$

Im Gegensatz zu klassischen Teilchen stellt es für Elektronen einen Unterschied dar, ob beide Spalte gleichzeitig offen sind oder ob einer nach dem anderen geöffnet wird. Beim Vergleich von Abb. 2 (a) und (c) fällt auf, dass bei zwei geöffneten Spalten (Abb. 2 (a)) es mehrere Intensitätsminima gibt, an denen fast keine Elektronen nachgewiesen wurden. Aber an diesen Stellen ist die Elektronenintensität größer, wenn nur ein Spalt geöffnet ist. Auf den ersten Blick mag das Verhalten solcher Quantenobjekte (Elektronen, Photonen, Atome) –im folgenden abgekürzt mit QO- recht regellos erscheinen. Beim Doppelspaltexperiment mit Elektronen wurden einzelne Elektronen als „Flecke“ auf dem Schirm nachgewiesen. Niemand konnte vor-

hersagen, wo das nächste Elektron landen wird. Man kann aber die Wahrscheinlichkeit dafür angeben, wo das nächste Elektron nachgewiesen wird. Die Intensitätsverteilung der Elektronen wurde in den vg. Versuchen durch eine Verteilungsfunktion *P(x)* charakterisiert, die angab, wie hoch die Intensität an einer bestimmten Stelle *x* war. Diese Verteilungsfunktion *P(x)* interpretiert man quantenmechanisch als eine **Wahrscheinlichkeitsdichte**. $P(x) \bullet \Delta V$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, ein Elektron im Raumbereich ΔV um den Ort *x* herum zu finden. An Stellen, wo die Wahrscheinlichkeit hoch ist, werden viele Elektronen registriert. Entsprechend werden an Stellen mit niedriger Wahrscheinlichkeit weniger Elektronen gefunden. Eine derartige Wahrscheinlichkeitsaussage lässt sich natürlich nur überprüfen, indem man eine große Zahl von Experimenten an *identisch präparierten* einzelnen Elektronen macht. Der Begriff „identisch präpariert“ bedeutet hierbei folgendes:

Zunächst versucht man, an einem physikalischem Objekt (z. B. Licht oder Elektronen) eine bestimmte dynamische Eigenschaft (z. B. Wellenlänge oder kinetische Energie) herzustellen. Um sicherzustellen, dass es die gewünschte Eigenschaft besitzt, führt man ein zweites Experiment durch, das diese Eigenschaft überprüft. Besitzt das Objekt die Eigenschaft, zeigt es sie in diesem Test. Wenn man mit Sicherheit vorhersagen kann, dass ein Test eine bestimmte Eigenschaft bestätigt, dann ist die Vorstellung erlaubt, dass das Objekt diese Eigenschaft wirklich *besitzt*, sie also dem Objekt auch *unabhängig vom Test* zukommt. Wir werden später sehen, dass im Bereich der Quantenphysik diese Vorschrift sehr genau beachtet werden muss. Es wird sich herausstellen, dass man in Widerspruch zu den Phänomenen gerät, wenn man QO eine Eigenschaft unabhängig von einer Präparation, einem Test oder einer Messung zuschreibt.

Im Doppelspaltexperiment wird diese Vorschrift eingehalten: Sehr viele von einander unabhängige (d.h. sich nicht gegenseitig beeinflussende) Elektronen, diese werden als *Ensemble* bezeichnet, durchlaufen die gleiche Versuchsapparatur. Wir merken uns den Grundsatz, dass die Wellenfunktion einem Ensemble von identisch präparierten QO zugeordnet ist, die diese präparierte Eigenschaft tatsächlich besitzen. Es hat sich als vorteilhaft herausgestellt, nicht mit *P(x)* selbst zu arbeiten, sondern mit einer Funktion $\Psi(x)$, die man **Wellenfunktion** nennt. Man erhält *P(x)* aus $\Psi(x)$ durch Quadrieren: $P(x)=|\Psi(x)|^2$.

Der zentrale Punkt, der es erlaubt, den Welle-Teilchen-Dualismus in der QM zu überwinden, ist nun, dass die Wellenfunktion $\Psi(x)$ sich nach den **Gesetzen der klassischen Wellenlehre** entwickelt! Das bedeutet, dass sich $\Psi(x)$ ähnlich wie eine klassische Wasser-, Schall- oder elektromagnetische Welle, ausbreitet, wobei alle typischen Wellenphänomene (Interferenz, Beugung am Spalt) auftreten.

Die Interpretation von $P(x)=|\Psi(x)|^2$ als Wahrscheinlichkeitsdichte ist eines der zentralen Elemente der QM. Die Beziehung

$$\boxed{P(x) \bullet \Delta V = |\psi(x)|^2 \bullet \Delta V} \qquad (3)$$

ist die „**Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation**“.

Max Born, 1882 - 1970

Wegen der großen Bedeutung dieser Interpretation für die QM, wollen wir sie im folgenden näher ausführen.

Machen wir uns wiederum anhand des Doppelspaltexperiments klar, welche Konsequenzen die wellengemäße Ausbreitung von $\Psi(x)$ zusammen mit $|\Psi(x)|^2$ hat. Die Elektronen wurden als „Flecke“ detektiert, zeigten also beim Nachweis teilchenartiges Verhalten. Dieses Verhalten erreicht man, wenn das Experiment nur mit einzelnen Elektronen durchgeführt wird.

Allmählicher Aufbau des Doppelspalt-Inteferenzmusters aus einzelnen Aufschlägen

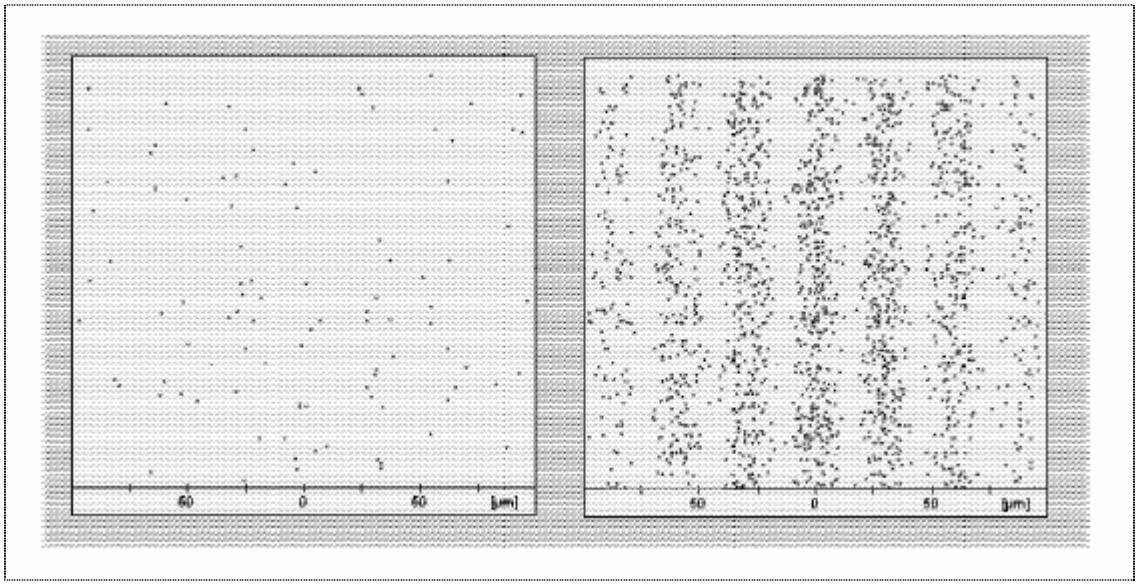


Abbildung 5

Führt man das Doppelspaltexperiment mit einzelnen Elektronen durch, so hinterlassen sie punktförmige „Flecke“ an scheinbar zufälligen Stellen auf dem Schirm (Abb. 5). Je mehr Elektronen nachgewiesen werden, ist festzustellen, dass sich ein Muster herausbildet. Wir wollen uns nun darauf konzentrieren, welche Vorhersagen man über den Ort auf dem Schirm machen kann, an dem ein bestimmtes Elektron nachgewiesen wird. Wir wiederholen den Versuch von neuem. Können Sie vorhersagen, an welcher Stelle auf dem Schirm das erste Elektron nachgewiesen wird? Es dürfte nicht gelungen sein, den Ort dieses neuen Flecks vorherzusagen. Die Unmöglichkeit einer detaillierten Vorhersage über Einzelereignisse ist etwas ganz Neues und charakteristisch für die QM.

Die Vorhersage wird erfolgreicher, wenn man das Experiment ein wenig modifiziert. Es sollen nun 100 Elektronen hinzugefügt werden. Können Sie vorhersagen, an welchen Stellen viele Elektronen landen werden und an welchen Stellen wenige? Vermutlich war die Vorhersage im letzten Experiment recht zuverlässig. Dies liegt daran, dass wir von einer Aussage über ein **Einzelereignis** zu einer **Wahrscheinlichkeitsaussage** übergegangen sind. Tatsächlich ist es ein ganz allgemeiner Zug der QM, dass im allgemeinen keine Vorhersagen über Einzelereignisse möglich sind; man ist daher gezwungen, zu statistischen Aussagen überzugehen. Wir merken uns den Grundsatz: Die QM macht statistische Aussagen über die relative Häufigkeit der Ergebnisse bei oftmaliger Wiederholung des gleichen Experiments. Aussagen über Einzelereignisse sind im allgemeinen nicht möglich.

Es erscheint uns recht seltsam, dass sich aus vielen dieser Flecke dennoch das Interferenzmuster herausbildet, das typisch für Wellenverhalten ist. Im Lichte der Born’schen Wahrscheinlichkeitsinterpretation haftet diesem Ergebnis nichts Geheimnisvolles mehr an. Die Elektronen werden durch eine Wellenfunktion $\Psi(x)$ beschrieben, die sich nach klassischen Wellengesetzen ausbreitet. In Analogie zur Wellenoptik bildet sich eine Beugungsfigur.

Wahrscheinlichkeitsverteilung (graue Schattierung) und nachgewiesene Elektronen (schwarze Punkte)

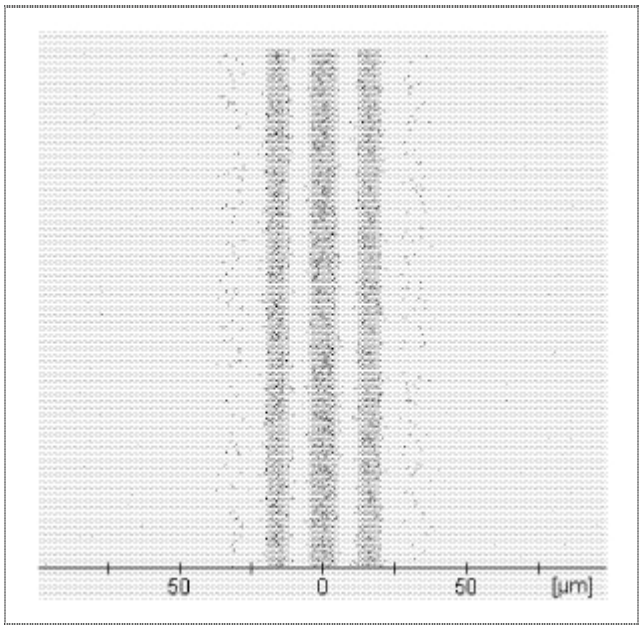


Abbildung 6

Die Abbildung zeigt die Wahrscheinlichkeitsverteilung als graue Schattierung und die nachgewiesenen Elektronen als schwarze Punkte. Je dunkler die Schattierung, um so größer ist $|\Psi(x)|^2$. Dagegen gibt $\psi(x)|^2 \bullet \Delta V$ die Wahrscheinlichkeit an, ein Elektron an einem bestimmten Ort, als teilchenhaft nachzuweisen (schwarze Punkte in Abb. 6). Dies zeigt, dass die statistischen Aussagen der QM *reproduzierbar* sind: Jedes mal wenn die gleiche Serie von Experimenten durchgeführt wird, ergibt sich *dieselbe* Verteilung der relativen Häufigkeiten.

Betrachten wir erneut das Doppelspaltexperiment, bei dem nur Spalt 1 geöffnet ist (Abb. 2 (b) bzw. Abb. 7). Man ordnet diesen QO eine Wellenfunktion $\Psi_1(x)$ zu, die sich wie eine Wasserwelle halbkreisförmig hinter Spalt 1 ausbreitet.

Wellenfunktion beim Doppelspalt-Experiment

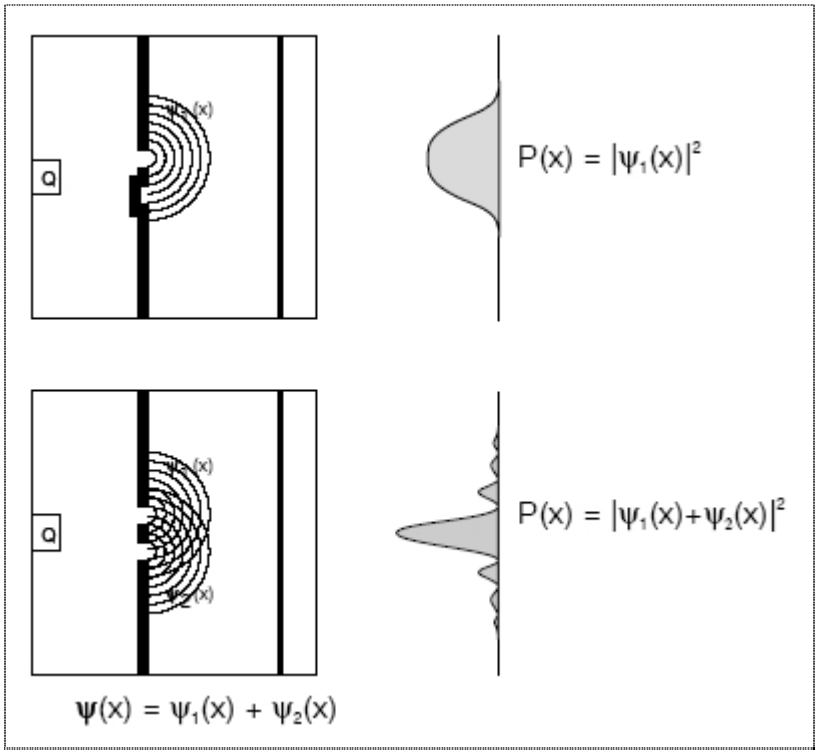


Abbildung 7

Die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron auf dem Schirm an der Stelle x zu finden, ist durch $P_1(x)=|\Psi_1(x)|^2$ gegeben. Sie ist hinter Spalt 1 am größten. Das Ensemble von Elektronen, auf das sich die Wellenfunktion $\Psi_1(x)$ bezieht, besteht aus einer Menge von einzelnen Elektronen, die alle dem gleichen Präparationsverfahren unterzogen wurden, indem sie Spalt 1 durchquert haben. Jedes Elektron wird an einem anderen Ort auf dem Schirm nachgewiesen, wobei es einen teilchenhaften Fleck hinterlässt. Die Verteilung, die sich auf dem Schirm nach dem Nachweis von sehr vielen Elektronen ergibt, ist ein Abbild der Wahrscheinlichkeitsfunktion $P_1(x)$. Wird Spalt 1 verschlossen und Spalt 2 geöffnet, ergibt sich die Wellenfunktion $P_2(x)$, die von Spalt 2 ausgeht. Die Wahrscheinlichkeitsfunktion ist durch $P_2(x)=|\Psi_2(x)|^2$ gegeben. Nimmt

man die beiden Verteilungen der getrennt durchgeführten Experimente zusammen, erhält man die Gesamtverteilung wie in Gl. (1):

$$\boxed{P(x) = P_1(x) + P_2(x)} \qquad (4)$$

Anders sieht die Situation aus, wenn im Doppelspaltexperiment beide Spalte geöffnet sind. Jetzt geht von beiden Spalten eine Welle aus. Nach der klassischen Wellentheorie überlagern sich die beiden Wellen, wie man es z. B. auf der Oberfläche eines Sees beobachten kann, wenn man zwei Steine nicht allzu weit entfernt voneinander ins Wasser wirft. Mathematisch wird die Addition beider Wellenfunktionen zum Ausdruck gebracht durch:

$$\boxed{\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x)} \qquad (5)$$

Nun kommt der entscheidende Punkt: Die Wahrscheinlichkeitsfunktion *P(x)* erhält man aus der Wellenfunktion (5) durch Quadrieren: $P(x) = |\Psi(x)|^2$. Setzt man die Wellen (5) ein, ergibt sich der Ausdruck:

$$P(x) = \left|P_1(x) + P_2(x)\right|^2$$

$$\boxed{P(x) = \left|\psi_1(x)\right|^2 + \left|\psi_2(x)\right|^2 + 2 \cdot \psi_1(x) \cdot \psi_2(x)} \qquad (6)$$

Hier wird angenommen, dass die Wellenfunktion reell ist.

In der Wahrscheinlichkeitsfunktion *P(x)* tritt zu den beiden Einzel-Spalt-Verteilungsfunktionen $P_1(x) = |\Psi_1(x)|^2$ und $P_2(x) = |\Psi_2(x)|^2$ noch ein *zusätzlicher Term* hinzu, den man **Interferenzterm** nennt. Man kann die letzte Gleichung auch folgendermaßen schreiben:

$$\boxed{P(x) = P_1(x) + P_2(x) + 2 \cdot \psi_1(x) \cdot \psi_2(x)} \qquad (7)$$

Man kann so *erklären*, warum man beim Doppelspaltexperiment mit zwei geöffneten Spalten eine Verteilung der Elektronen findet, für die gilt (vgl. Gl. (2)):

$$\boxed{P(x) \neq P_1(x) + P_2(x)} \qquad (8)$$

für die man also nicht einfach die beiden Einzelverteilungen $P_1(x)$ und $P_2(x)$ addieren kann. Der Vergleich mit (7) macht deutlich: Der Interferenzterm, der sich beim Ausmultiplizieren ergeben hat, ist dafür verantwortlich, das in (8) kein Gleichheitszeichen steht. Das Ensemble von sehr vielen Elektronen, die einzeln die Versuchsanordnung „Doppelspalt“ durchlaufen, wird durch die Wellenfunktion $\Psi(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x)$ beschrieben. Durch Quadrieren der Wellenfunktion $\Psi(x)$ erhält man die Wahrscheinlichkeitsfunktion *P(x)*, die den für einen Überlagerungszustand charakteristischen Interferenzterm enthält. Die Wahrscheinlichkeitsfunktion wiederum bestimmt die Wahrscheinlichkeit für jedes einzelne Elektron, an einer bestimmten Stelle auf dem Schirm gefunden zu werden. Dabei wird es als Teilchen nachgewiesen. Sehr viele Elektronen, die auf dem Schirm nachgewiesen werden, hinterlassen auf dem Schirm eine Verteilung, welche die *Wellenstruktur* der Wahrscheinlichkeitsfunktion *P(x)* widerspiegelt.

Da wir die explizite mathematische Form der Wellenfunktion an dieser Stelle noch nicht kennen, können wir zwar noch nicht bestätigen, dass die genaue Form der Verteilung tatsächlich korrekt wiedergegeben wird. Wir können aber an der *Struktur* der Gleichung und ihrer Interpretation ablesen, dass das Problem des Welle-Teilchen-Dualismus, das unser Verständnis der Quantenphänomene erschwert, überwunden ist.

Heisenberg'sche Unbestimmheitsrelation

Werner Heisenberg, 1901 - 1976

„Präparieren" bedeutet, dass bei Messungen der präparierten Größe zu einem Ensemble von Kugel die Streuung der Messwerte verschwindet bzw. sehr klein wird. Ein Beispiel ist der waagerechte Wurf, bei dem Kugeln einer parabelförmigen Bahn folgen, nachdem sie von einer Abschussvorrichtung abgeschossen wurden (Abb. 7.1)

Präparation und Bahnkurve beim waagerechten Wurf

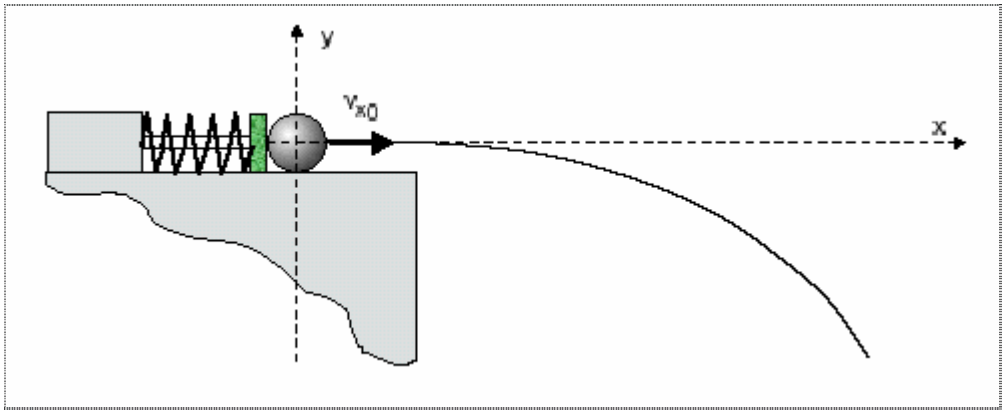


Abbildung 7.1

Die Kugeln bewegen sich immer auf der gleichen Bahn, sofern alle die gleichen Anfangsbedingungen besitzen, d. h. identische Werte am Abschussort und der Abschussgeschwindigkeit. Diese Vorrichtung kann man bauen, wie Abb. 7.1 zeigt. Die Erfahrung zeigt, dass es in der klassischen Physik keine prinzipielle untere Grenze für die gleichzeitige Verkleinerung der Streuungen in den Anfangsbedingungen gibt.

Beim waagerechten Wurf reicht das die Präparation einer einzelnen Größe allerdings nicht aus. Zur Herstellung gleicher Anfangsbedingungen für alle Kugeln müssen Ort und Impuls *gleichzeitig* präpariert werden, und zwar sowohl in *x*- als auch in *y*-Richtung. Dieser Umstand erscheint nicht weiter bemerkenswert. Nach allen Alltagserfahrungen kommt es einem selbstverständlich vor, dass man zwei Eigenschaften gleichzeitig präparieren kann, wenn man jede von ihnen einzeln präparieren kann.

Umso überraschender ist es, dass in der QM genau dies nicht der Fall ist: Es gibt Paare von Eigenschaften (z. B. Ort und Impuls) deren gleichzeitige Präparation prinzipiell nicht möglich ist, obwohl die Präparation jeder einzelnen auf keine grundsätzlichen Grenzen stößt. Dies ist der Inhalt der Heisenberg'schen Unbestimmtheitsrelation, die nun näher erläutert wird.

Hierzu machen wir ein Experiment mit Elektronen am Einzelspalt.

Elektronen dicht hinter dem Einzelspalt

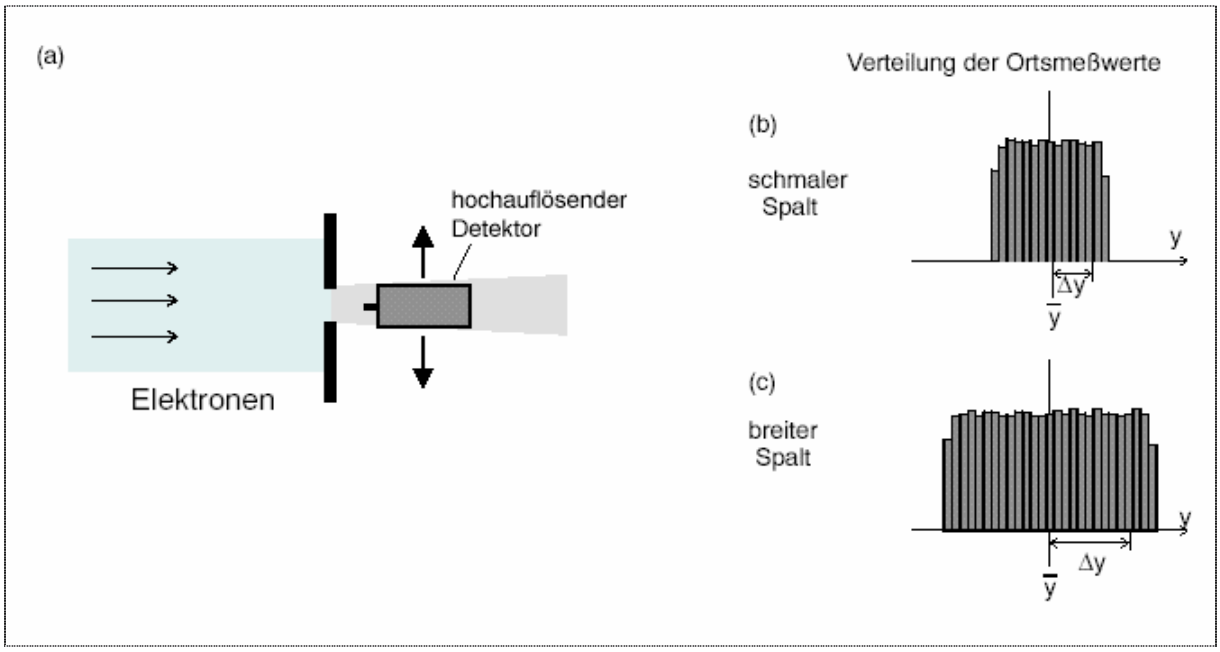


Abbildung 7.2

Ein Strahl Elektronen fällt auf einen Spalt der Breite d. Unmittelbar hinter dem Spalt steht ein hochauflösender Detektor, der die Elektronen mit einer weit höheren Auflösung als der Spaltbreite nachweisen kann. Er registriert die Zahl der Elektronen, die pro Sekunde an einer bestimmten Stelle ankommen.

Der Detektor führt Ortsmessungen an den Elektronen durch, die vom Spalt durchgelassen werden. Natürlich wird man so dicht hinter dem Spalt alle Elektronen in dem kleinen Gebiet finden, das vom Spalt nicht abgedeckt ist. Um die Verteilung der Messwerte innerhalb dieses Gebietes statistisch zu erfassen, ermittelt man ihren Mittelwert $\bar{y}$ und ihre Standardabweichung Δy. Der Mittelwert gibt an, wo die Verteilung der Messwerte ihren „Schwerpunkt" besitzt, die Standardabweichung ist ein Maß für die Streuung.

Die Verteilung der Ortsmesswerte sieht wie in Abb. 7.2 (b) aus. Die Elektronen sind gleichmäßig hinter dem Spalt verteilt. Die Standardabweichung der Ortsmesswerte

ist von der Größenordnung der Spaltbreite. Wenn der Spalt relativ schmal ist, ist auch die Streuung recht klein. Bei einem breiteren Spalt weisen die Ortsmesswerte eine größere Streuung auf (Abb. 7.2 (c)).

Mit der Standardabweichung Δy hat man ein Maß gefunden, mit dem man die **Güte einer Präparation** festlegen kann. Wenn die Streuung der Messwerte Null ist, ist die Präparation perfekt (im Fall der Ortspräparation mit einem Spalt ist dies nicht zu erreichen, weil man dazu den Spalt immer enger machen müsste, bis er schließlich ganz verschlossen ist). Wenn die Standardabweichung nicht Null ist, bedeutet das, dass die Messwerte streuen. In diesem Fall ist die Präparation nicht perfekt und die Standardabweichung gibt darüber Auskunft, wie sehr die Präparation der betreffenden Eigenschaft von einer idealen Präparation abweicht. Eine kleine Standardabweichung bedeutet, dass die Eigenschaft relativ gut präpariert ist, während bei einer großen Standardabweichung keine gute Präparation vorliegt.

Nach der Heisenberg'schen Unbestimmtheitsrelation kann man an einem Ensemble von QO Ort und Impuls nicht gleichzeitig perfekt präparieren. Nachdem wir im vorherigen Abschnitt mit der Standardabweichung ein Maß für die Güte einer Präparation gefunden haben, können wir fragen, *in welchem Ausmaß* Orts- und Impulspräparation unvereinbar sind. Das bedeutet: Wenn man eine experimentelle Anordnung betrachtet, bei der Ort und Impuls nur näherungsweise präpariert werden – gibt es dann eine Grenze, wie nahe man dem Ideal einer perfekten Präparation kommen kann?

Hierzu modifizieren wir den Versuch mit Elektronen am Einzelspalt, d.h. der Detektor befindet sich nicht mehr dicht hinter dem Spalt, sondern in etwas größerer Entfernung, d. h. wir betrachten den Versuch, mit Hilfe eines Spalts an Elektronen gleichzeitig Ort y und Impuls p_y senkrecht zur Strahlrichtung zu präparieren.

Elektronen am Einzelspalt

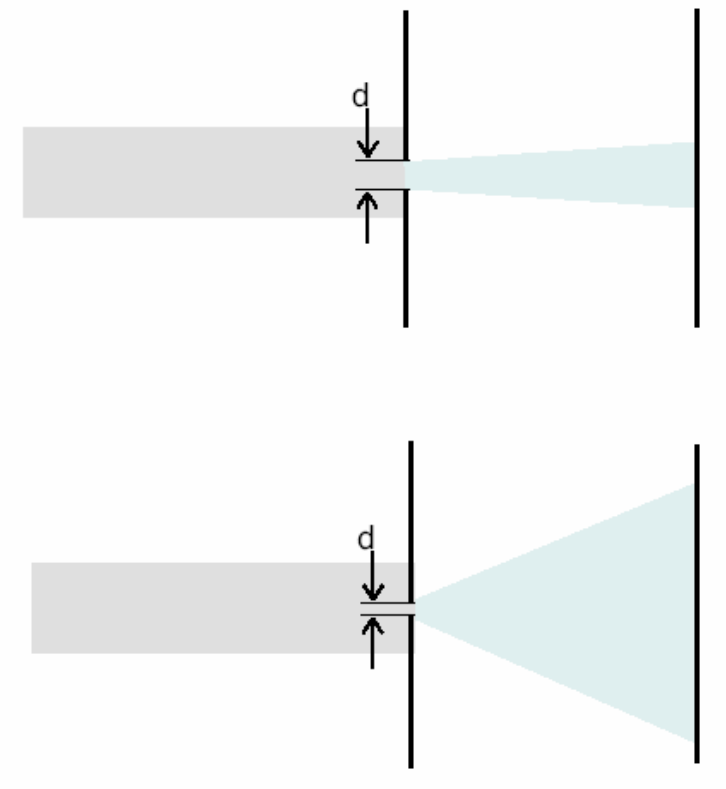


Abbildung 7.3

Die Güte der Orts- bzw. Impulspräparation wird durch die Streuung der Messwerte einer entsprechenden Testmessung beschrieben. An dem Ensemble von Elektronen, das durch den Spalt präpariert wird, nimmt man also – genau wie im vorigen Abschnitt – die Verteilung der Ortsmesswerte unmittelbar hinter dem Spalt auf. Dann ersetzt man den hochauflösenden Ortsdetektor durch ein Impulsmessgerät und ermittelt damit die Verteilung der Impulsmesswerte. Beide Verteilungen werden in ein Diagramm übertragen und ihre Standardabweichungen werden ermittelt. So erhält man die Ortsstreuung und die Impulsstreuung .

Verteilung der Orts- und Impulsmesswerte für einen breiten und einen schmalen Einzelspalt

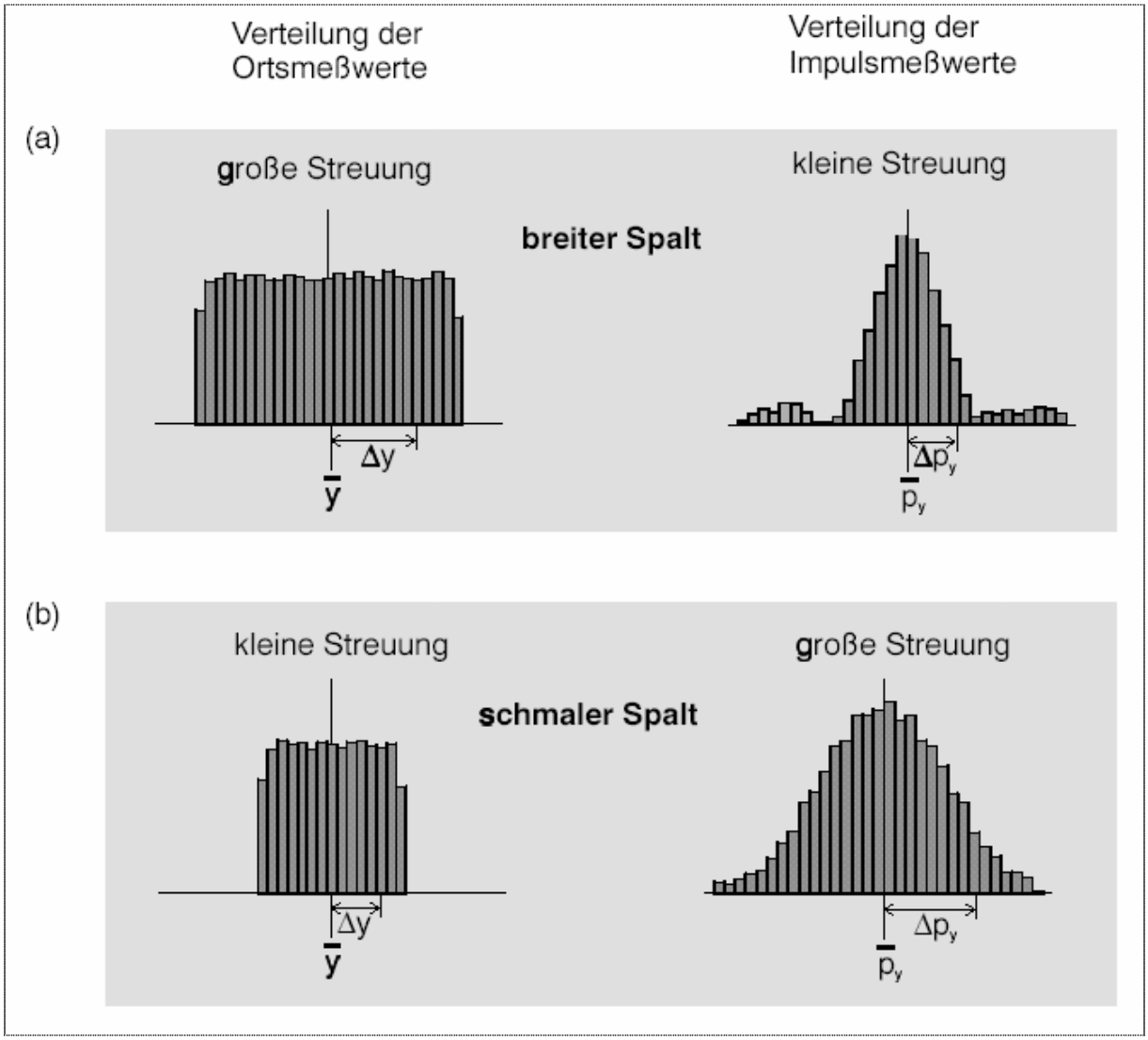


Abbildung 7.4

Die Ergebnisse sind in Abb. 7.4 gezeigt: Für einen breiten Spalt ergibt sich eine relativ große Ortsstreuung, aber eine kleine Impulsstreuung (Abb. 7.4 (a)). Dagegen ist bei einem schmalen Spalt die Ortsstreuung klein, aber die Impulsstreuung groß (Abb. 7.4 (b)). Die beiden Streuungen scheinen im vorliegenden Beispiel reziprok miteinander verknüpft zu sein: Die Streuung der Impulsmesswerte nimmt zu, wenn die

Streuung der Ortsmesswerte abnimmt und umgekehrt. Man kann sich nun diesen reziproken Zusammenhang zwischen Orts- und Impulsstreuung theoretisch plausibel machen. Die Quelle präpariert Elektronen mit der Eigenschaft „Impuls“. Alle Elektronen besitzen in *x*-Richtung den Impuls $p_x = \sqrt{2mE_{kin}}$. -diesen Zusammenhang werden wir später herleiten (s. Gl. (15a))- und keine Komponente in *y*-Richtung: $p_y=0$.

Abschätzung der Impulsstreuung

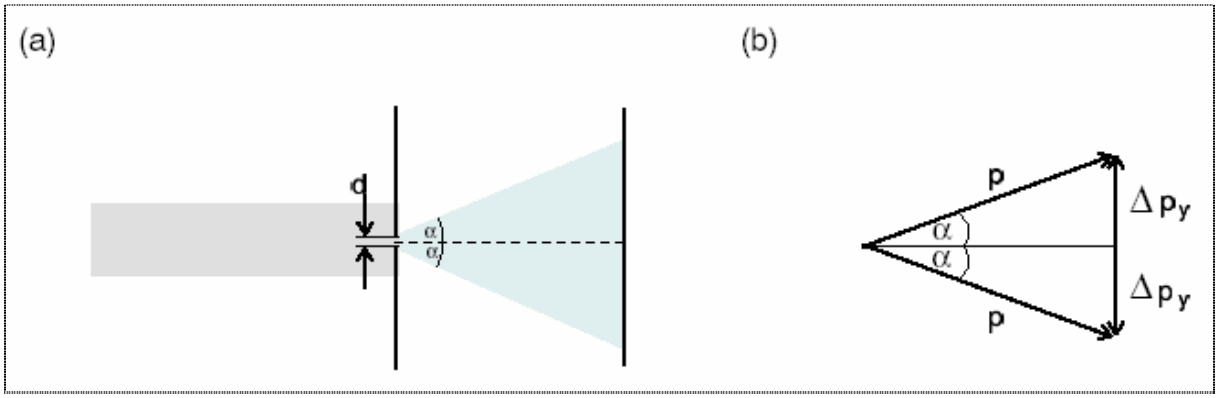


Abbildung 7.5

Durch die Beugung am Spalt verliert der Elektronenstrahl seine ursprüngliche Impulseigenschaft. Hinter dem Spalt misst man die in Abb. 7.5 gezeigte statistische Streuung der Querimpulse p_y. Auf dem Weg vom Spalt zum Schirm weitet sich der Strahl daher auf und bildet das beobachtete Beugungsmuster aus. Je größer die Streuung der Querimpulse ist, desto breiter wird das Beugungsbild auf dem Schirm ausfallen. Daher kann man mit der Breite des Beugungsmusters auf dem Schirm die Streuung der Impulsmesswerte am Spalt abschätzen. Der Großteil der Elektronen wird auf dem Schirm innerhalb des Hauptmaximums der Beugungsfigur registriert, also innerhalb des Winkelbereichs zwischen $+\alpha$ und $-\alpha$ (Abb. 7.5 (a)). Zur Abschätzung der Streuung der Querimpulse Δp_y kann man sich daher auf diesen Bereich beschränken. Aus Abb. 7.5 (b) liest man den Zusammenhang $\Delta p_y \approx p \cdot \sin\alpha$ ab. Der Bereich des Hauptmaximums ist durch die ersten Beugungsminima begrenzt, dessen Lage aus der klassischen Optik bekannt ist: $\sin\alpha=\lambda/d$. Im Fall der Elektronen ist λ die de-Broglie-Wellenlänge des auf Impuls präparierten einfallenden Strahls $\lambda=h/p$, auch diesen Zusammenhang werden wir später herleiten, (s. Gl. (15)). Also gilt: $\sin\alpha=h/(pd)$. Setzt man $\sin\alpha=\Delta p_y/p$ ein, ergibt sich $\Delta p_y=h/d$. Mit $d\approx\Delta y$ erhalten wir $\boldsymbol{\Delta p_y \cdot \Delta y \approx h}$ Gl. (8a).

Dies ist die gesuchte Gleichung, die für unser Spaltbeispiel die Streuungen der Orts- und der Impulsmesswerte in gesetzmäßiger Weise miteinander verknüpft. Das Produkt der beiden Streuungen ist in diesem Beispiel immer von der Größenordnung der Planckschen Konstanten *h*. Daher muss bei jedem Versuch, die Ortsstreuung Δy durch Verengen des Spalts zu verringern, die Streuung der Querimpulse Δp_y größer werden und umgekehrt. Gl. (8a) stellt die quantitative Formulierung der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation für das spezielle Beispiel des Spalts dar. Sie besitzt jedoch einen viel größeren Gültigkeitsbereich. In ihrer allgemeinen Form regelt sie generell, wie gut Orts- und Impulspräparation gleichzeitig möglich sind. Die untere Schranke für die gleichzeitige Präparation von Ort und Impuls ist $\boldsymbol{\Delta p_y \cdot \Delta y \geq h/4\pi}$. Dies wird durch das Größer—Zeichen zum Ausdruck gebracht. Der gegenüber Gl. (8a) geänderte Vorfaktor ist durch die bei der Ableitung dieser Gleichung gemachten Abschätzung bestimmt.

Kapitel 2 Herleitung der Schrödinger- Gleichung

Einstieg mit der Wellenfunktion nach der klassischen Wellenlehre

Mit der in Kapitel 1 aus dem Doppeltspaltexperiment hergeleiteten Wellenfunktion $\Psi(x, t)$ haben wir eines der zentralen Elemente zur mathematischen Erfassung von **Quantenobjekten (QO)** kennen gelernt. Sie ist eine Funktion des Ortes und der Zeit, die sich wie eine Welle ausbreitet. Es werden die Elektronen durch diese Wellenfunktion beschrieben.

Im folgenden soll nun die Einführung in den formalen mathematischen Apparat der **Quantenmechanik** (QM) gegeben werden, an der man sieht, wie das „seltsame" Verhalten der QO mathematisch erfassbar wird. Es wird gezeigt, wie man aus der Wellenfunktion Aufschluss über andere physikalische Größen gewinnt und wie man die Funktion selbst bestimmen kann. Auch hier gilt, dass das Thema wesentlich kürzer hätte gefasst werden können, jedoch wird auch mit diesem Kapitel versucht, das Verständnis für den Zusammenhang zwischen mathematischem Formalismus und physikalischem Experiment zu erleichtern.

Wir beginnen unsere Überlegungen mit dem einfachst möglichen Beispiel, nämlich mit einem Ensemble von Elektronen, die durch ein Präparationsverfahren in einen Zustand mit bestimmter kinetischer Energie E_{kin} gebracht wurden.

Präparation der Eigenschaft „kinetische Energie" durch eine Beschleunigungsspannung

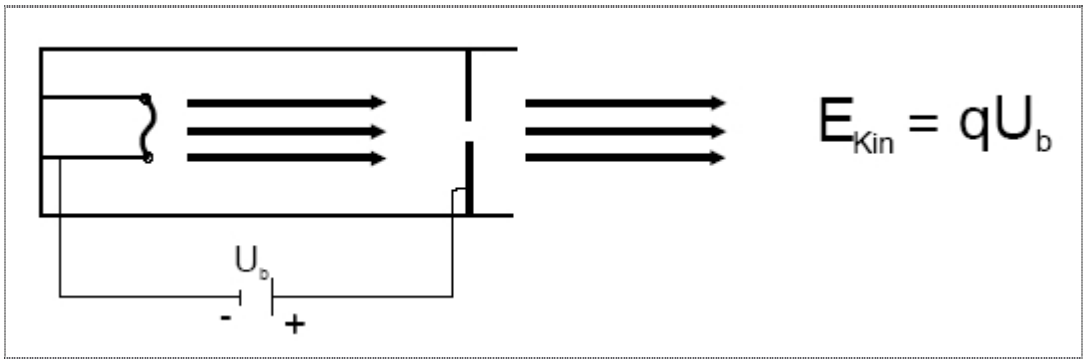


Abbildung 8

Eine Möglichkeit Elektronen in einen Zustand mit bestimmter kinetischer Energie zu bringen bietet die Kathodenstrahlröhre. Wenn sie ohne angelegte Anodenspannung betrieben wird, erscheint ein bläuliches Glimmen. Zwischen Kathode und Anode fließt kein Strom. Nach Anlegen der Beschleunigungsspannung U_b zwischen Kathode und Anode sieht man einen geradlinigen Elektronenstrahl. Es fließt ein elektrischer Strom. Die Elektronen werden durch die angelegte Spannung U_b beschleunigt (Abb. 8). Der erste Teil des Versuchs zeigt, dass die Elektronen ohne die anliegende Beschleunigungsspannung keine nennenswerte kinetische Energie besitzen. Nach dem Durchlaufen der Beschleunigungsstrecke besitzen die Elektronen die kinetische Energie $E_{kin}=qU_b$. Innerhalb geringer Fehlergrenzen haben alle Elektronen, die diese

Präparationsvorrichtung durchlaufen, dieselbe kinetische Energie. Sie bilden daher ein Ensemble von Elektronen, das auf „kinetische Energie“ präpariert ist. Jedes einzelne Elektron, das zu diesem Ensemble gehört, besitzt die **Eigenschaft** „kinetische Energie:

$$E_{Kin} = q \cdot U_b \qquad (9)$$

Wie kann man nun diese Elektronen mathematisch beschreiben? Wie sieht die Wellenfunktion $\Psi(x)$ aus, die ihnen zugeordnet ist?

Wir erinnern uns: Der zentrale Punkt, der es erlaubt, den Welle-Teilchen-Dualismus in der QM zu überwinden, ist, dass die Wellenfunktion $\Psi(x)$ sich nach den **Gesetzen der klassischen Wellenlehre** entwickelt! Daher wird zunächst die Struktur einer den Gesetzen der klassischen Wellenlehre unterliegende Wellengleichung hergeleitet.

Bei den aus dem klassischen Bereich der Physik bekannten Wellen (wie z.B. Wasserwellen) handelt es sich um harmonische Wellen in Gestalt fortlaufender Sinus- und Kosinusfunktionen (*sin(x, t)*, *cos(x, t)*, s. Abb. 9).

Vergleich Wellengleichung mit Funktionsvorschrift *s(0, t)* und *sin(x, t)*

Betrachten wir eine Welle, die sich im Startzeitpunkt *t=0* in Ruhelage und am Ort *x=0* befindet und dann beginnt mit der Periodendauer *T* zu schwingen. Trägt man die Auslenkung *s* in Abhängigkeit von der Zeit *t* graphisch auf, so erhält man den Funktionsverlauf *s(0, t)*. Hierbei stellt s_{max} die Amplitude dar.

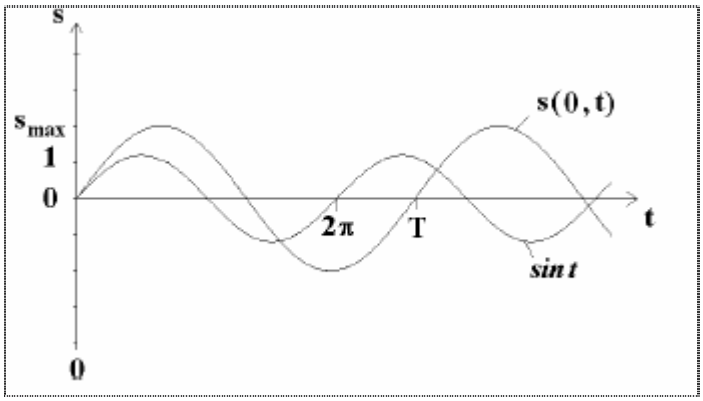
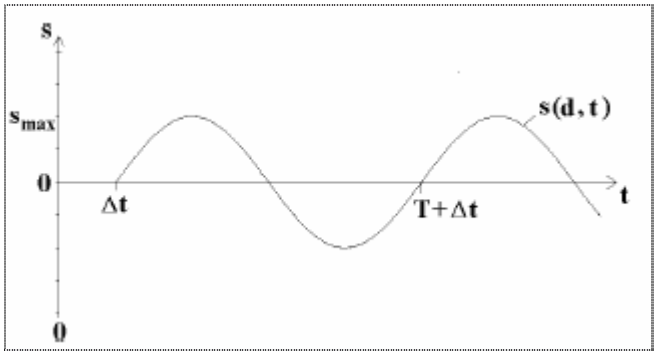


Abbildung 9

Wir suchen nun eine Formel, mit der man die Auslenkung *s* am Ort *x* zum Zeitpunkt *t* berechnen kann. Um herauszufinden, durch welche Funktionsvorschrift sich der Kurvenverkauf *s(0,t)* beschreiben lässt, vergleichen wir ihn mit dem Kurvenverlauf der Funktion *f(t)=sin(t)* (Sinus-Funktion). Der Vergleich zeigt, dass die Funktion *s(0, t)* aus der Funktion *f(t)* durch eine Streckung entlang der s-Achse um den Faktor $S_{max}/1$ und durch eine Streckung längs der t-Achse um den Faktor $T/2\pi$ hervorgeht. Daher kann man die gesuchte Funktion in der Form schreiben:

$$s(0,t) = s_{\max} \bullet \sin(\frac{2\pi}{T} \bullet t) \qquad (10)$$

Damit haben wir eine erste Wellenfunktion. Versuchen wir nun diesen Zusammenhang weiter zu verallgemeinern. Dazu betrachten wir die gleiche Welle, die aber nach Startzeitpunkt *t=0* um eine Zeitspanne *Δt* erst später zu schwingen beginnt. Bei unveränderter Ausbreitungsgeschwindigkeit nach rechts (Phasengeschwindigkeit) von *c=λ/T* (*λ* ist die Länge einer Welle) wird während der Zeitspanne *Δt* die Strecke c•*Δt=d* zurückgelegt.



Um das gleiche Ergebnis zu erhalten wie zuvor, muss die Variable *t* durch *t-Δt* und *x=0* durch *x=d* ersetzt werden. Es ergibt sich dann

$$s(d,t) = s_{\max} \bullet \sin[(\frac{2\pi}{T} \bullet (t - \Delta t)] \qquad (11)$$

Mit *Δt=d/c und c=λ/T* kann man für *Δt* auch *Δt=d*•T/*λ* einsetzen. Da der Abstand *d* beliebig gewählt werden kann, wird d durch die Variable x ersetzt. Eingesetzt in (11) erhalten wir die gesuchte allgemeine Wellengleichung mit Bezug auf die Sinusfunktion:

$$s(x,t) = s_{\max} \bullet \sin(2\pi \frac{t}{T} - 2\pi \frac{x}{\lambda}) \qquad (12)$$

Die gleiche Vorgehensweise gilt für die Kosinusfunktion. Der Ausdruck *1/T* heißt Frequenz der Schwingung und der Ausdruck *2π/T* Kreisfrequenz der Schwingung. Es ist naheliegend, die gesuchte Wellenfunktion der Elektronen Ψ_{EKin} **versuchsweise** ebenso anzusetzen. Mit Bezug auf Sinus- und Kosinusfunktion ergibt sich:

$$\Psi E_{Kin}(x,t) = A\sin(2\pi \frac{x}{\lambda} - 2\pi \frac{t}{T}) + B\cos(2\pi \frac{x}{\lambda} - 2\pi \frac{t}{T}) \qquad (13)$$

Dies ist die aus der klassischen Wellenlehre hergeleitete Ausgangsgleichung für unsere Wellenfunktion, die wir nun für unsere quantenmechanischen Betrachtungen verwenden. Dabei sind *A* und *B* konstante Faktoren. Der von *t* abhängige Term gibt die Zeitabhängigkeit der Welle an einem bestimmten Ort wieder. Die Vertauschung von *t* und *x* im Argument der Gl. (12) im Vergleich zu Gl. (13) ist kein Problem, das dies durch entsprechende Vorzeichen der Konstanten *A*, *B* berücksichtigt wird.

Momentaufnahme einer Welle zu einem bestimmten Zeitpunkt *t*.

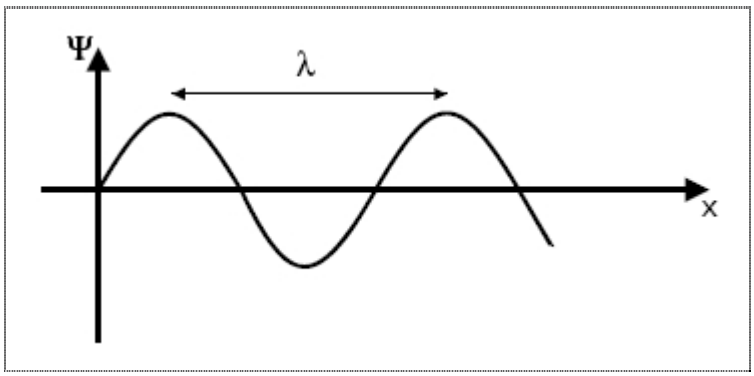


Abbildung 10

Wellenlänge eines Elektrons

Gl. (13) repräsentiert den Funktionsverlauf nach Abb. 10. In diesem Bild wurde das typische Kennzeichen einer Welle, nämlich die Wellenlänge λ, eingetragen. Wie ist nun die Wellenlänge λ eines Elektrons definiert? Wie ist der Zusammenhang zwischen Wellenlänge λ und kinetischer Energie E_{kin}? Die Beantwortung dieser Fragen ist unerlässlich, denn wir suchen ja gerade eine Wellenfunktion für Elektronen, die mit der Eigenschaft „kinetische Energie“ präpariert sind.

Die Mathematik kann hier zunächst nicht weiterhelfen. Als erstes müssen wir die physikalischen Zusammenhänge zwischen λ und E_{kin} klären. Um diesen Zusammenhang zu finden, müssen wir uns Einblick in die „finstere“ Quantenwelt der Elektronen verschaffen. Hierzu werden wir im folgenden eine Reihe von Experimenten vorstellen und dabei sehen, dass es sich hierbei um Experimente handelt, die für die QM von zentraler Bedeutung sind. Wir beginnen mit dem Experiment, dass Licht Elektronen aus Metalloberflächen herauslösen kann.

Hallwachs-Effekt, UV-Licht löst Elektronen aus Metalloberflächen

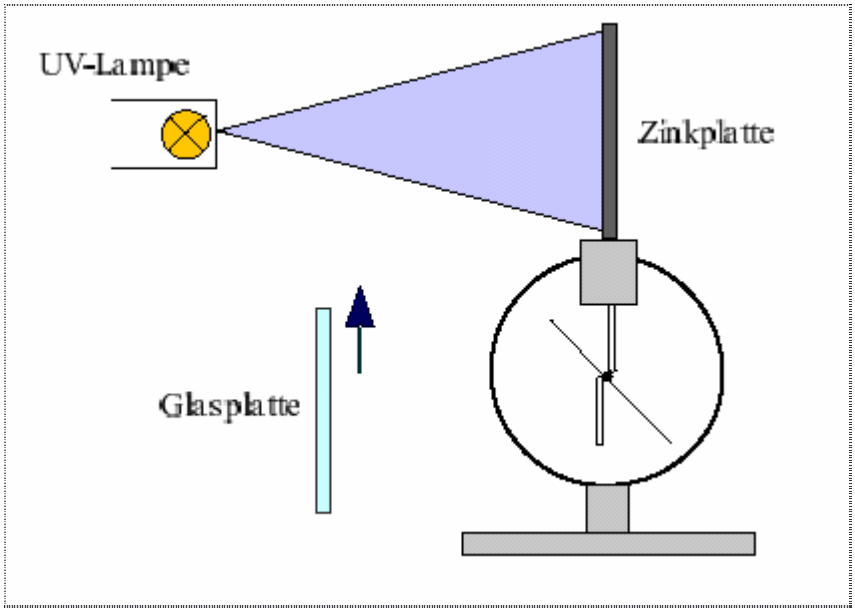


Abbildung 11

Eine frisch geschmirgelte Zinkplatte wird nach Abb. 11 auf ein Elektroskop gesteckt und durch einen kurzen Kontakt mit dem Minuspol einer Hochspannungsquelle negativ aufgeladen. Danach wird die Platte mit dem Licht aus einer Quecksilberdampflampe bestrahlt, das einen hohen Anteil an ultraviolettem Licht enthält. Wir beobachten, dass die Platte sich rasch entlädt (der Elektroskopausschlag geht auf Null zurück). Dagegen entlädt sich das Elektroskop nicht, wenn man eine Glasplatte in den Strahlengang bringt. Eine mögliche Erklärung für den Ausgang des Versuchs besteht darin, dass Elektronen das Metall verlassen, wenn man es mit Licht bestrahlt. Das Licht scheint Elektronen aus der Zinkplatte „herauszuschlagen“ (Abb. 12).

Photoeffekt, Licht löst Elektronen aus Metalloberflächen

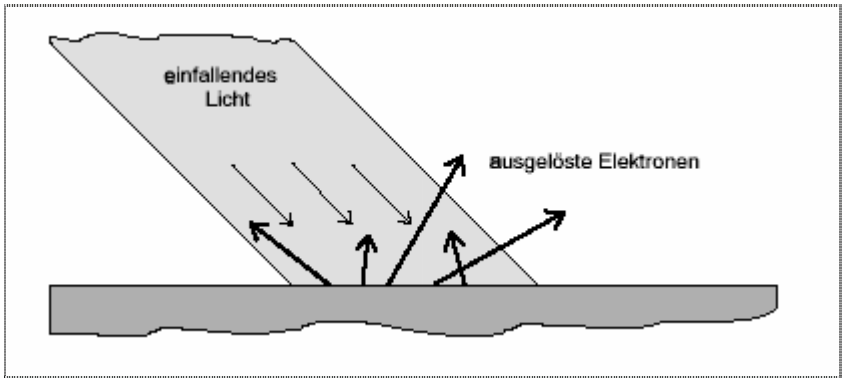


Abbildung 12

Allerdings kann nur UV-Licht den Effekt auslösen, wie das Einführen der Glasplatte zeigt.

Nachweis des Photostroms mit einer Photozelle

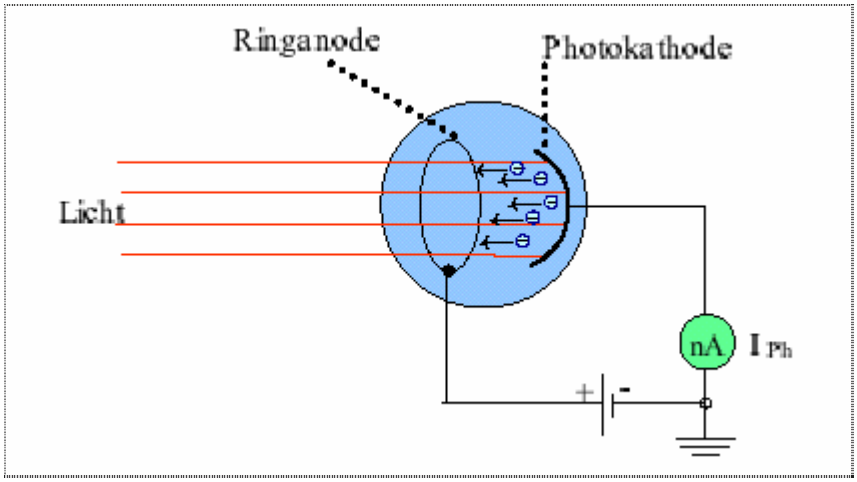


Abbildung 13

In einer evakuierten Röhre befinden sich zwei Elektroden (Abb. 13). Auf die Kathode ist eine metallische Schicht (z B. Kalium) aufgedampft. Die Anode besteht aus einem Metallring und dient als Auffangelektrode für die ausgelösten Elektronen. Man nennt eine solche Röhre eine Photozelle; die Metallschicht auf der Kathode wird auch als Photoschicht bezeichnet. Wird die Photoschicht von außen mit Licht bestrahlt, so zeigt das über einen Messverstärker angeschlossene Amperemeter einen Strom I_{Ph}, den Photostrom, an. Im Unterschied zum vorherigen Experiment (Abb. 11) wurde hier ein Metall verwendet, bei dem der Photoeffekt auch mit sichtbarem Licht auftritt. Die ausgelösten Elektronen werden zur Anode hingezogen. In der Photoschicht entsteht durch die fehlenden Elektronen ein Ladungsdefizit. Es wird dadurch ausgeglichen, dass über das Amperemeter Elektronen nachfließen. Die Elektronenverschiebung wird als Photostrom I_{Ph} registriert. Die Bestimmung der kinetischen Energie der Elektronen gelingt mit der sogenannten Gegenfeldmethode. Dabei werden die Elektronen auf dem Weg zur Anode durch eine Gegenspannung U_g abgebremst. Der Photostrom wird Null, wenn die Gegenspannung gerade soweit erhöht wird, dass auch die schnellsten Elektronen die Potenzialdifferenz zwischen Kathode und Anode nicht mehr überwinden können. Für die Energie der schnellsten Elektronen gilt dann $E_{Kin,max}=eU_g$. Damit lässt sich die maximale Elektronenenergie über die angelegte Gegenspannung bestimmen.

Gemessene Gegenspannungen für verschiedene Frequenzen

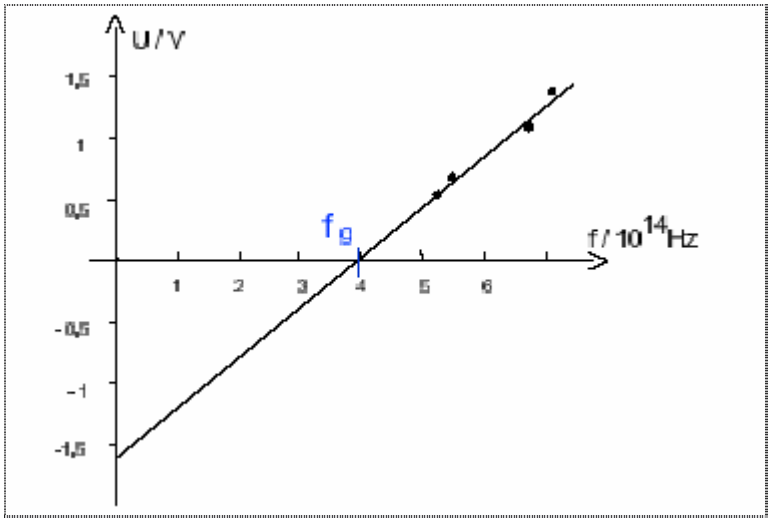


Abbildung 14

Demnach gilt:

$$E_{Kin,\max} = e \cdot U_g = h \cdot f - W_A \qquad (14)$$

Hierbei bedeutet *h* die Proportionalitätskonstante zwischen kinetischer Energie und Frequenz (Steigung der Kurve) und W_A die Austrittsarbeit (U/V-Wert für f=0), denn um die Metalloberfläche von innen nach außen zu überwinden, muss das Elektron eine für das Metall jeweils charakteristische Arbeit leisten. Aus präzisen Messungen identifiziert sich h als das **Plank'sche Wirkungsquantum**.

Max Planck, 1858 - 1947

Sie ist eine fundamentale Naturkonstante und kennzeichnende Größe von Quanteneffekten. Es gilt:

$$E_{Kin,\max} = h \cdot f \qquad (14a)$$

Nun wird die Kathode der Photozelle mit einer Quecksilberdampflampe beleuchtet. Um monochromatisches Licht (das ist „einfarbiges“ Licht) zu erzeugen, werden Interferenzfilter oder ein Geradschichtprisma benutzt. Man nutzt dabei aus, dass im Licht der Quecksilberdampflampe nicht alle Frequenzen enthalten sind, sondern nur ganz bestimmte (Spektrallinien). Für die verschiedenen Lichtfrequenzen werden die Gegenspannungen U_g bestimmt, bei denen der Photostrom verschwindet und die Messwerte in ein eUg-f-Diagramm übertragen. Man stellt auch hier fest, dass die für verschiedene Frequenzen des auffallenden Lichts gemessenen Werte für die Gegenspannung auf einer Geraden liegen (Abb. 14). Dies stimmt mit Gl. (14) überein.

Um den Photoeffekt zu erklären, benötigt man *eine neuartige Modellvorstellung* von der Natur des Lichts. In dem neuen Modell strömt Licht nicht als kontinuierliche elektromagnetische Energie von der Lichtquelle weg, sondern in einer Vielzahl von Energieportionen, vergleichbar einem *Strom von Teilchen*. Diese **Energieportionen** nennt man **Photonen**. Der Photoeffekt wird in diesem Modell als „Stoß“ zwischen Photonen und Elektronen gedeutet. Ein Elektron wird aus dem Metall herausgeschlagen, wenn es von einem Photon getroffen wird und dessen gesamte Energie übernimmt. Für diese Teilchentheorie des Lichts spricht auch ein weiterer experimenteller Befund: Die Photonen besitzen einen *Impuls p*. Das zeigt sich z. B: im Phänomen des Staubschweifs von Kometen. Er ist immer von der Sonne weggerichtet, weil die Photonen des Sonnenlichts einen Impuls auf die Staubteilchen übertragen.

Wie wir mit dem nächsten Experiment (Abb. 15) feststellen werden, gilt im Quantenbereich $c = \lambda \cdot f$. Hierbei ist c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum. Daher kann man für Gl. (14a) also für $E=hf$ auch den Ausdruck $E=hc/\lambda$ schreiben und es ergibt sich die Gleichung $E/c=h/\lambda=p$. In dieser Gleichung taucht mit p ein neuer Begriff auf: der **Impuls**. Diese Gleichung zeigt, das eine Strahlung, die den Impuls P auf Materie überträgt, mit der Strahlungsenergie E über die Gleichung $p=E/c$ verknüpft ist. Diese Beziehung kann man experimentell bestätigen (Abb. 15). Der Ausdruck $p=h/\lambda$ ist die **de-Broglie-Beziehung** zwischen Wellenlänge und Impuls.

Louis de Broglie, 1892 - 1987

Durch Einsetzen von $\lambda=c/f$ in vg. Gleichung für p erhält man den Ausdruck

$$\boxed{p=\frac{h\bullet f}{c}=\frac{h}{\lambda}} \qquad (15)$$

Diese Hypothese wird nun experimentell getestet. Wieder greifen wir auf das Experiment mit der Elektronenbeugungsröhre zurück (Abb. 5.1). Zunächst stellen wir aber eine theoretische Erwartung für die Wellenlänge λ der im Experiment verwendeten Elektronen auf. Im Experiment durchlaufen die Elektronen in der Elektronenbeugungsröhre eine Beschleunigungsspannung U_B. Sie werden dabei auf die kinetische Energie $E_{kin}=eU_B$ präpariert. Alle Elektronen, die von der Graphitfolie gebeugt werden, besitzen diesen Wert der kinetischen Energie. Mit $E_{kin}=½mv^2$ (m ist die Elektronenmasse und v deren Geschwindigkeit nach Präparation) und $v=p/m$ ergibt sich der übliche Ausdruck $\boldsymbol{E_{kin}=p^2/(2m)}$ Gl. (15a). Diesen Ausdruck umgestellt nach p und eingesetzt in die de-Broglie-Beziehung $\lambda=h/p$ (Gl.15) ergibt die **de-Broglie-Wellenlänge**:

$$\boxed{\lambda=\frac{h}{\sqrt{2m\cdot E_{kin}}}=\frac{h}{\sqrt{2m_e\cdot U_B}}} \qquad (16)$$

Damit haben wir den gesuchten Zusammenhang zwischen Wellenlänge des Elektrons und kinetischer Energie gefunden. Mit U_B=5 KV erhalten wir für die de-Broglie-Wellenlänge den Wert $\lambda=1{,}7\bullet10^{-11}$m. Bevor wir diesen theoretischen Zusammenhang bzw. Ergebnis akzeptieren, wird nun das Experiment quantitativ ausgewertet.

Geometrie bei der Elektronenbeugung

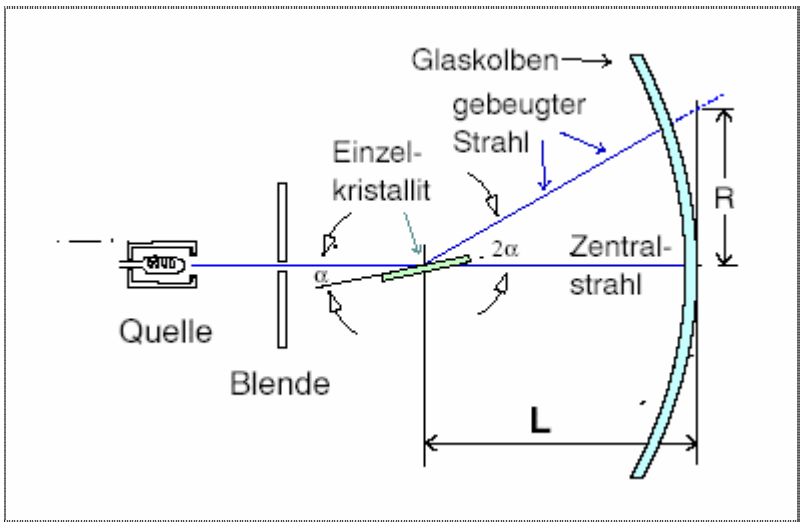


Abbildung 15

Man muss dazu wissen, dass der Graphitkristall zwei Netzebenen mit den Abständen *d*=0,213 nm und *d*=0,123 nm besitzt (Abb. 16).

Netzebenen im Graphitkristall

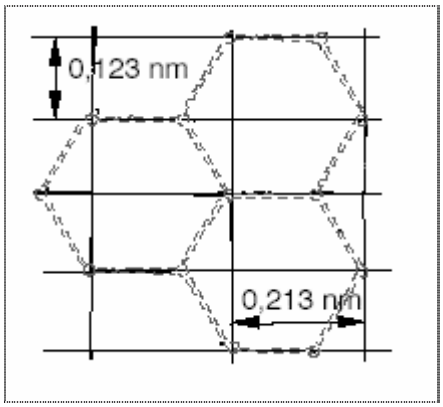


Abbildung 16

Zudem muss man die „Bragg- Bedingung“ für dieses Experiment kennen. In Analogie zur „Bragg- Reflexion“ von Röntgenstrahlung lautet die Bragg- Bedingung für beide Netzebenen:

$$\lambda = 2d\sin\alpha \qquad (17)$$

Entsprechend der Versuchsanordnung (Abb. 15) ist der Winkel α klein, so dass gilt $2\sin\alpha \approx \sin 2\alpha \approx \tan 2\alpha$. Aus der Geometrie der Anordnung (Abb. 15) kann man ablesen:

$$\tan 2\alpha = \frac{R}{L}, \qquad (18)$$

wobei R der Radius der Beugungsringe und L der Abstand des Kristalls vom Schirm ist (im vorliegenden Experiment ist L=0,135 nm. Gleichung (17) wird also zu

$$\lambda = d\,\frac{R}{L} \tag{19}$$

Man misst die Radien R_1=0,011 nm und R_2=0,019 nm. Für den ersten Ring mit dem Netzabstand d_1=0,213 nm ergibt sich somit λ=1,7•10^{-11} m, ebenso für den zweiten Ring mit d_2=0,123 nm. In beiden Fällen stimmt das experimentell erschlossene Ergebnis für λ mit der theoretischen Erwartung nach de Broglies Hypothese überein!

Nach diesem Diskurs durch drei verschiedene Experimente können wir den theoretischen Zusammenhang der de-Broglie- Wellenlänge in Gl. (16) als bewiesen ansehen. Damit können wir auf dieses Ergebnis zurückgreifen und in der Erarbeitung eines mathematischen Formalismus für die QM fortzufahren. Im folgenden rechnen wir der Einfachheit halber mit $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ (gelesen „*h quer*“) weiter. Durch Einsetzen von Gl. (16) und „h quer“ in unsere allgemeine Wellenfunktion (13), erhalten wir:

$$\psi E_{Kin}(x,t) = A\sin\left(\frac{\sqrt{2mE_{kin}}}{\hbar}\cdot x - 2\pi\frac{t}{T}\right) + B\cos\left(2\pi\frac{\sqrt{2mE_{kin}}}{\hbar}\cdot x - 2\pi\frac{t}{T}\right) \tag{20}$$

Dies ist die mit unseren physikalischen Experimenten im Einklang stehende und einem auf kinetische Energie E_{kin} präparierten Ensemble von Elektronen zugeordnete **Wellenfunktion eines freien Elektrons**. Sie der Ausgangpunkt unserer weiteren Überlegungen zur Herleitung der nach Erwin Schrödinger benannten Wellengleichung.

Erwin Schrödinger, 1887 - 1961

Nun aber tritt die Mathematik unwiderstehlich in den Vordergrund. Wir werden uns im folgenden Abschnitt mit den zentralen mathematischen Konzepten der QM auseinander setzen. Es wird gezeigt, dass sich hinter dieser Mathematik nichts geheimnisvolles verbirgt.

Operator der kinetischen Energie

Im vorausgegangen Abschnitt wurde untersucht, wie QO mathematisch zu beschreiben sind. Die Vorgehensweise orientierte sich dabei an dem in Experimenten üblichen Verfahren. Um ein Experiment an QO durchführen zu können, muss man sie erst in den gewünschten Zustand bringen, d. h. eine *Präparation* durchführen. In unserem Fall wurden Elektronen mit einer Beschleunigungsspannung so präpariert, dass sie die Eigenschaft „kinetische Energie“ besitzen. Diesem experimentellen „Herstellen“ eines bestimmten Zustandes durch Präparation entspricht auf der theoretischen Seite die Angabe einer **Wellenfunktion**. Dies wird in Abbildung 17 symbolisiert.

Präparation und Wellenfunktion

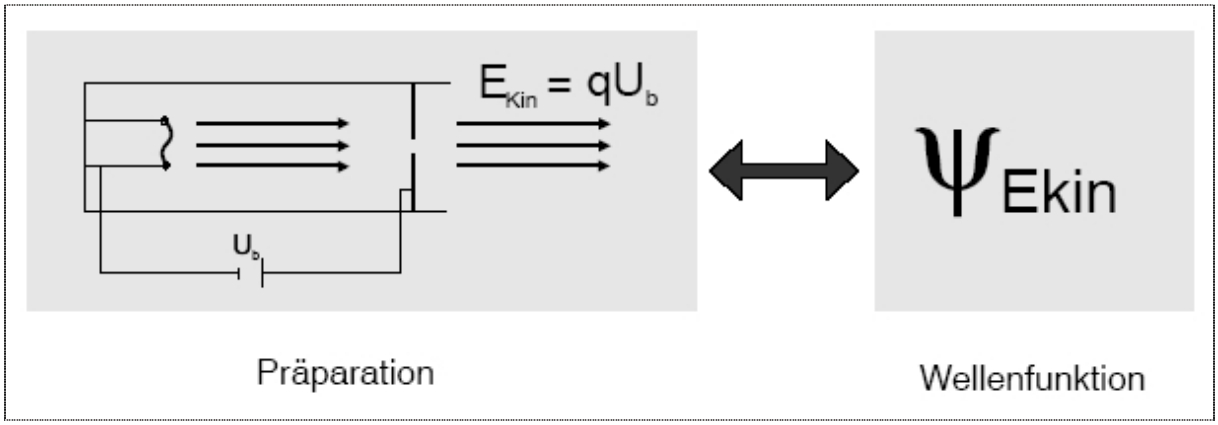


Abbildung 17

Mit der Wellenfunktion kann man ein durch Präparation hergestelltes Ensemble von QO **charakterisieren**. Den Elektronen, die mit einer Beschleunigungsspannung in einen Zustand mit der Eigenschaft „*kinetische Energie* E_{kin}“ gebracht wurden, ist zur Beschreibung die Wellenfunktion Ψ_{EKin} (Gl. 20) zugeordnet.

Umgekehrt kann man die folgende experimentelle Situation betrachten: Man hat ein auf kinetische Energie präpariertes Ensemble von Elektronen vorliegen und möchte den Wert der kinetischen Energie erschließen. Im Experiment geschieht dies durch **Messung**. Die Elektronen treffen auf ein Messgerät, dieses zeigt nach der Messung den Wert der kinetischen Energie an (Abb. 18 (a)).

Gleichermaßen sollte man auch aus der Wellenfunktion Ψ_{EKin} ermitteln können, welchen Wert der kinetischen Energie das zugehörige Ensemble besitzt. Es sollte also möglich sein, wie in Abb. 18 (b) dargestellt, mit Hilfe einer mathematischen Operation aus der Wellenfunktion Ψ_{EKin} den Wert E_{kin} zu erhalten. Dies leisten in der QM die Operatoren. Diese werden oft als **Hamilton-Operator** bezeichnet.

Sir William Hamilton, 1805 - 1865

Analogie zwischen Messung und Anwendung eines Operators

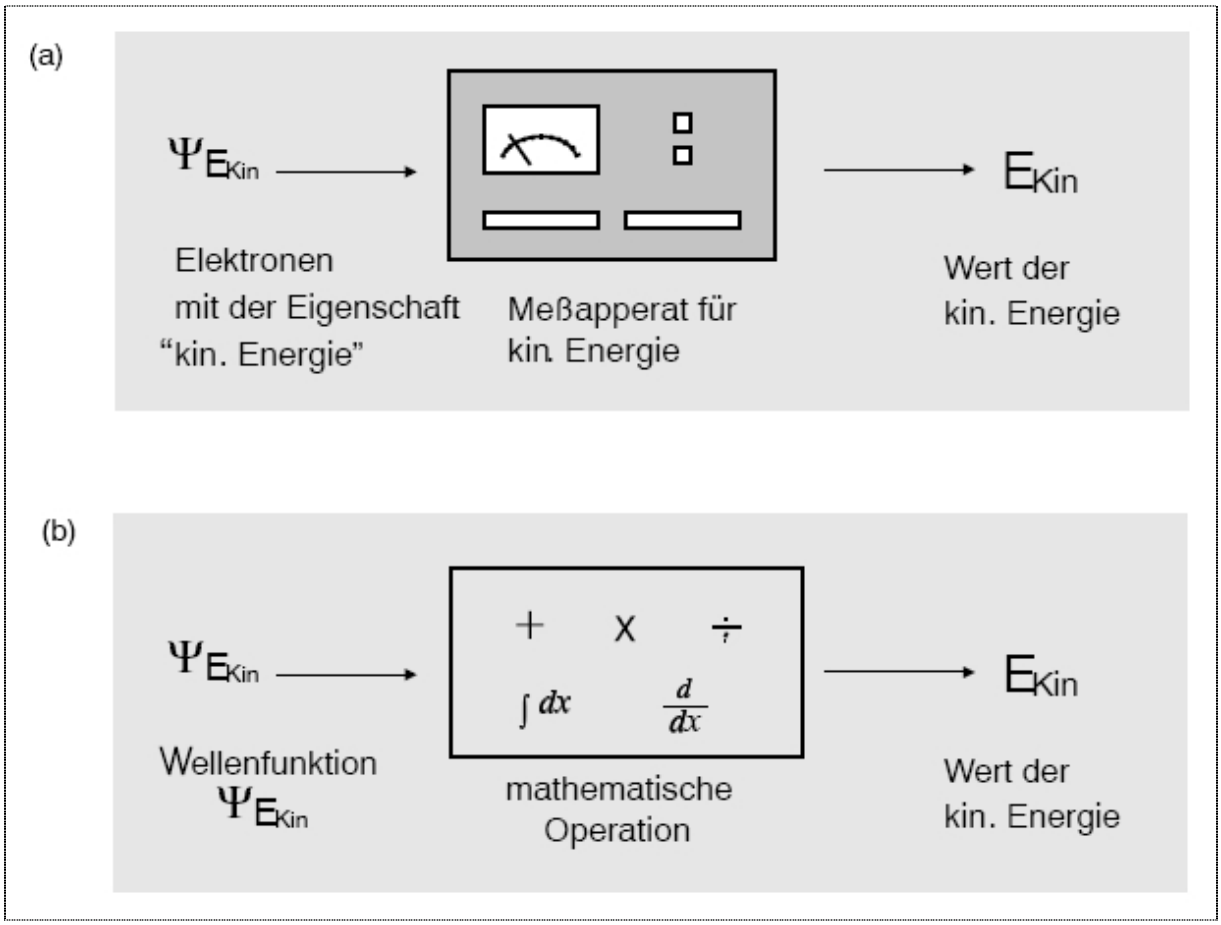


Abbildung 18

Ein Operator ist die Anweisung, eine bestimmte mathematische Operation an der Wellenfunktion ψ durchzuführen. Dabei kann es sich um einfache Operationen handeln wie die Multiplikation mit einer Konstanten oder einer Funktion oder um eine eher komplizierte Operation wie die Differentiation. Man symbolisiert die Anwendung eines Operators $\hat{A}$ auf die Wellenfunktion ψ durch die Schreibweise $\hat{A}\psi$. Das "Dach" über dem *A* soll dabei deutlich machen, dass es sich um einen Operator handelt.

Ist $\hat{A}$ der Operator „Multiplikation mit der Konstanten c", so bedeutet $\hat{A}\psi$ die Anweisnung „multipliziere ψ mit der Konstanten c":

$$\hat{A}\psi \quad \text{steht für} \quad c \bullet \psi \qquad (21)$$

Veranschaulichung der Wirkung eines Operators am Beispiel Differentitation

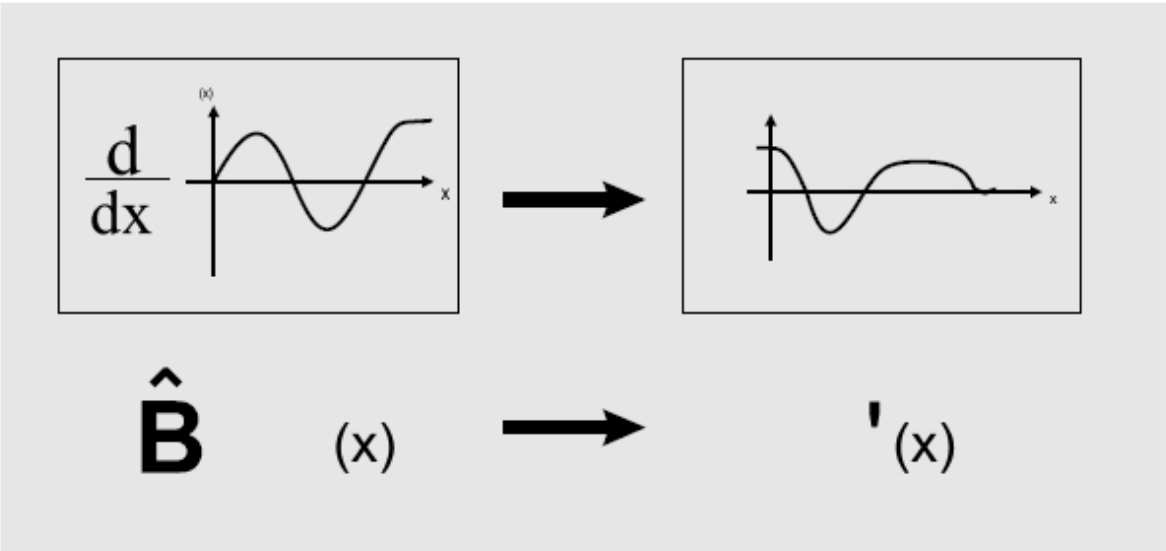


Abbildung 19

Wenn $\hat{B}$ der Operator „Differentiation nach x" ist, heißt $\hat{B}\psi$ „differenziere die Wellenfunktion ψ nach x:

$$\hat{B}\psi(x) \text{ steht für } \quad \Psi'(x) = \frac{d\Psi(x)}{dx} \qquad (22)$$

Mit diesem Konzept des Operators ist es möglich, die Eingangs gestellte Frage zu bearbeiten: Wie kann man aus der Wellenfunktion für auf kinetische Energie präparierte Elektronen (Gl. 20) den Wert der kinetischen Energie gewinnen? Gesucht ist ein Operator $\hat{E}_{kin}$, der nach Anwendung auf die Wellenfunktion ψE_{kin} den Wert E_{kin} liefert. Wie könnte dies konkret aussehen?

Zunächst halten wir fest, dass die Anwendung eines Operators auf die Wellenfunktion wieder eine Wellenfunktion ergibt. Zum Beispiel ergibt die Anwendung des Operators $\hat{B}\psi(x) = \Psi'(x) = \frac{d\Psi(x)}{dx}$ auf die Funktion $\psi(x)=A\sin(x)$ eine neue Wellenfunktion Acos(x). Dies ist in Abb. 19 symbolisiert.

Was könnte die Wellenfunktion sein, die sich durch Anwenden des Operators $\hat{E}_{kin}$ auf Ψ_{EKin} ergibt? Die Wellenfunktion Ψ_{EKin} repräsentiert ein Ensemble von Elektronen, das die Eigenschaft „kinetische Energie“ besitzt. Die plausibelste Annahme ist, dass der Operator $\hat{E}_{kin}$ diese Wellenfunktion weitgehend unverändert lässt. Dieser mathematische Ansatz steht in Analogie zu folgendem Prismenversuch mit Licht.

Prismenversuch mit Test auf Präparation einer Eigenschaft

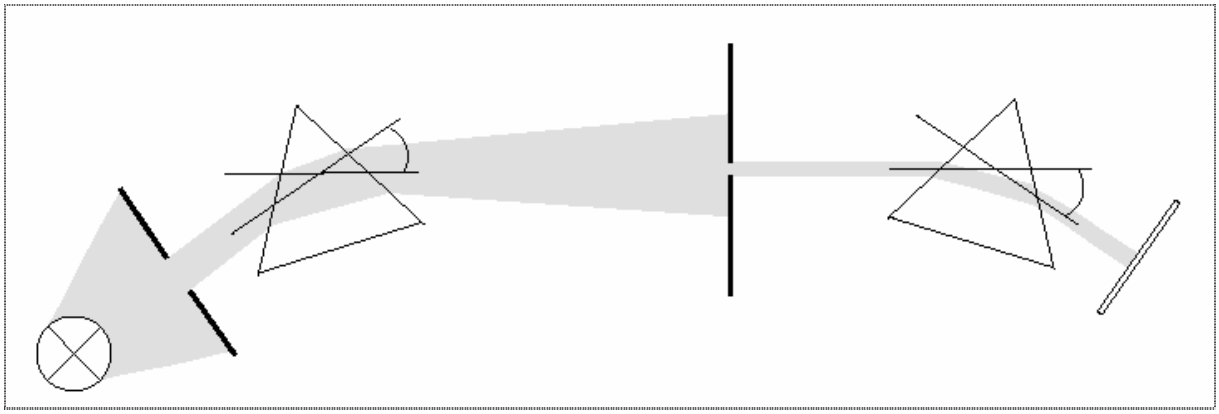


Abbildung 20

Leiten Sie in einem abgedunkelten Raum ein dünnes Lichtbündel weißen Lichts (Abb. 20) auf ein Prisma. Auf dem Schirm sehen Sie das aus der elementaren Optik bekannte farbige Regenbogenspektrum. Sie können nun Licht einer bestimmten Farbe herstellen (monochromatisches Licht), indem Sie hinter das Prisma eine Spaltblende stellen, die nur das Licht aus einem eng begrenzten Farbbereich (z. B. grün) durchlässt. Man kann vermuten, dass Licht einer bestimmten Farbe eine *Eigenschaft* besitzt, die dazu führt, dass es im Prisma um einen ganz bestimmten Winkel α abgelenkt wird. Diese Vermutung kann man folgendermaßen testen:

Lenken Sie das vorher erzeugte grüne Lichtbündel durch ein zweites Prisma auf den Schirm (Abb. 20). Sie werden sehen, dass es im zweiten Prisma nicht mehr aufgefächert wird. Wie vermutet wird es um den gleichen Winkel α wie im ersten Prisma abgelenkt. (Natürlich hängt der Winkel, um den der Strahl angelenkt wird, vom Einfallswinkel auf das Prisma ab. Nur wenn dieser bei beiden Prismen der gleiche ist, wird der Strahl in beiden Prismen um den gleichen Winkel abgelenkt.) Das im Experiment erzeugte Licht einer bestimmten Spektralfarbe besitzt also tatsächlich die Eigenschaft „wird um einen bestimmten Winkel α abgelenkt“. Dagegen besitzt das weiße Licht der Lampe diese Eigenschaft nicht; es wird aufgefächert.

In Analogie zu diesem Versuch, bei dem mit Prisma und Blende Licht auf die Eigenschaft „Wellenlänge“ präpariert wurde, das im zweiten Prisma nicht weiter aufgefächert werden konnte, sondern unverändert blieb, so bleibt auch die Wellengleichung weitgehend unverändert! Wenn wir nun fordern, dass die Wellenfunktion (Gl. 20) nur bis auf konstante Faktoren festgelegt ist, ist dies dann der Fall, wenn $\hat{E}_{kin}\psi E_{kin}$ sich von ψE_{kin} höchstens um einen konstanten Vorfaktor unterscheidet, also *proportional* (d. h. linear) zu ψE_{kin} ist. Wir stellen also an den Operator der kinetischen Energie zwei Forderungen (Abb. 21):

Wirkung des Operators $\hat{E}_{kin}$ auf die Wellenfunktion ψE_{kin}

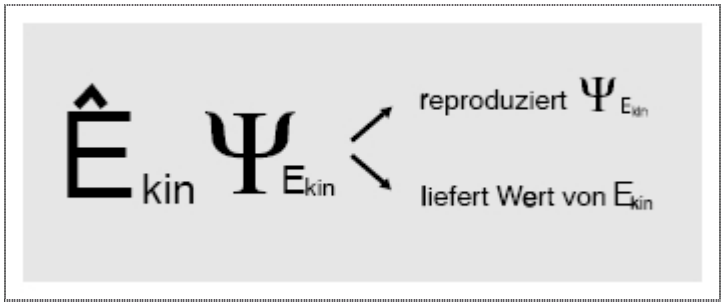


Abbildung 21

- Die Anwendung des Operators $\hat{E}_{kin}$ auf die Wellenfunktion ψE_{kin} soll diese bis auf konstante Faktoren reproduzieren.
- Es soll dabei die Information über den Wert der kinetischen Energie geliefert werden.

Unsere Wellenfunktion ψE_{kin} (Gl. 20) enthält die Sinus- und Kosinusfunktionen. Eine mathematische Operation, welche diese Funktionen reproduziert, ist die *Ableitung*. Differentiation von *sin(x)* führt zum Kosinus, nochmalige Ableitung wieder zurück zu *-sin(x)*. So ergibt sich aus Gl. 20 für den einfachsten Fall mit *A=1*, z.B. für den ersten Term nach einmaliger Ableitung:

$$\frac{d}{dx}\left[\sin\left(\frac{\sqrt{2mE_{kin}}}{\hbar}\cdot x-2\pi\frac{t}{T}\right)\right]=\frac{\sqrt{2mE_{kin}}}{\hbar}\left[\cos\left(\frac{\sqrt{2mE_{kin}}}{\hbar}\cdot x-2\pi\frac{t}{T}\right)\right] \qquad (23)$$

Nochmalige Ableitung liefert:

$$\frac{d^2}{dx^2}\left[\sin\left(\frac{\sqrt{2mE_{kin}}}{\hbar}\cdot x-2\pi\frac{t}{T}\right)\right]=-\frac{2mE_{kin}}{\hbar^2}\left[\sin\left(\frac{\sqrt{2mE_{kin}}}{\hbar}\cdot x-2\pi\frac{t}{T}\right)\right] \qquad (24)$$

Für den Kosinus-Term in (20) gilt eine entsprechende Gleichung, so dass die Wellenfunktion nach zweimaliger Differentiation in der Tat bis auf einen Faktor reproduziert wird:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi E_{kin}(x)=-\frac{2mE_{kin}}{\hbar^2}\cdot\psi E_{kin}(x) \qquad (25)$$

Damit ist die erste der beiden Forderungen erfüllt. Multiplizieren wir beide Seiten der Gl. (25) mit $\frac{-\hbar^2}{2m}$, ergibt sich:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}\psi E_{kin}(x)=E_{kin}\cdot\psi E_{kin}(x) \qquad (26)$$

Der Operator, der auf der linken Seite dieser Gleichung steht und auf die Wellenfunktion wirkt, erfüllt tatsächlich beide Forderungen, die wir an den Operator der kinetischen Energie gestellt haben. Er reproduziert nicht nur die Wellenfunktion ψE_{kin}, son-

dern gibt auch den Wert der kinetischen Energie an: E_{kin} ist gerade der Proportionalitätsfaktor auf der rechten Seite.

Die Kurzschreibweise für Gl. (26) lautet:

$$\boxed{\hat{E}_{Kin}\psi E_{Kin} = E_{Kin} \cdot \psi E_{Kin}} \qquad (27)$$

In der letzten Gleichung ist zu beachten, dass $\hat{E}_{kin}$ auf der linken Seite ein Operator ist (d. h. eine Anweisung, eine mathematische Operation an einer Wellenfunktion durchzuführen), E_{kin} auf der rechten Seite dagegen eine Zahl, die den Wert der kinetischen Energie angibt, den wir bei Messungen an den Elektronen dieses Ensembles finden. Diese letzte Gleichung ist schon die Schrödinger'sche Wellengleichung, hier noch ohne den Term für die potenzielle Energie $V(x)$, d. h. mit $V(x)=0$. Mit dem Operator $\hat{E}_{kin}$ der kinetischen Energie haben wir ein systematisches Verfahren gefunden, den Wert der kinetischen Energie E_{kin} aus einer Wellenfunktion ψE_{kin} zu ermitteln.

Wenn das die einzige Aufgabe wäre, zu der man den Operator $\hat{E}_{kin}$ benutzen könnte, wäre der Aufwand im Verhältnis zum Nutzen recht hoch. Aber Operatoren haben in der QM noch andere Aufgaben. Sie erlauben es, auf die Frage zurückzukommen, *ob und wann man QO eine bestimmte dynamische Eigenschaft zuschreiben kann*. Diese Frage hat sich z. B. bei den Doppelspaltexperimenten als eines der zentralen Elemente erwiesen, das die QM von der klassischen Physik unterscheidet. Mit der Benutzung von Operatoren, die auf Wellenfunktionen angewendet werden können, lässt sich dieses Problem nun auch auf der theoretischen Ebene angehen.

Eigenwertgleichung

Im letzten Abschnitt wurde der Operator der kinetischen Energie nur auf Wellenfunktonen angewendet, welche die Eigenschaft „kinetische Energie“ wirklich *besitzen* (also auf kinetische Energie präpariert wurden). Es gibt aber auch QO, die diese Eigenschaft *nicht besitzen*. Was passiert, wenn man $\hat{E}_{kin}$ auf eine Wellenfunktion $\psi(x)$ anwendet, die solche QO beschreibt?

Betrachten wir die Gauß'sche Wellenfunktion:

$$\boxed{\Psi Gauß\,(x) \approx e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}}, \qquad (29)$$

die ein Ensemble von QO beschreibt, das die Eigenschaft kinetische Energie nicht besitzt. Sie hat die Form einer Glockenkurve. $\psi_{Gauß}(x)$ beschreibt eine um den Ort x_0 zentrierte Wahrscheinlichkeitsverteilung mit der Breite σ. Wendet man $\hat{E}_{kin}$ auf diese Wellenfunktion an, ergibt sich:

$$\boxed{\hat{E}_{Kin}\Psi Gauß(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2}{dx^2}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left(\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^4}-\frac{1}{\sigma^2}\right)\cdot e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}} \qquad (29a)$$

Dies kann nicht in der Form $\hat{E}_{kin}\psi Gauß(x)=Konstante\bullet\psi(x)$ geschrieben werden.

In den beiden bisher betrachteten Beispielen hat sich gezeigt: Eine Wellenfunktion, die QO mit der Eigenschaft „kinetische Energie“ entspricht, wird bei Anwendung des Operators $\hat{E}_{kin}$ reproduziert. Für eine Wellenfunktion, die QO ohne diese Eigenschaft beschreibt, ist das nicht der Fall. Dies gilt nicht nur für diese beiden speziellen Beispiele, sondern ist eine allgemeine Tatsache:

Wenn $\hat{E}_{kin}$ auf eine Wellenfunktion $\psi(x)$ angewandt wird und das Ergebnis *nicht* proportional zu $\psi(x)$ ist, besitzen die durch $\psi(x)$ beschriebenen QO die Eigenschaft „kinetische Energie“ *nicht*. Misst man an einem Ensemble solcher QO die kinetische Energie, erhält man keinen einheitlichen Messwert, sondern die Messwerte streuen.

Wird dagegen $\hat{E}_{kin}\psi(x)$ proportional zu $\psi(x)$, besitzen die QO die Eigenschaft „kinetische Energie“. Man sagt in diesem Fall, dass die **Eigenwertgleichung** $\hat{E}_{kin}\psi(x)=E_{kin}\bullet\psi(x)$ erfüllt ist. Die Zahl E_{kin}, die den Wert der kinetischen Energie angibt, nennt man Eigenwert der kinetischen Energie. Bei einer Messung der kinetischen Energie wird dieser Wert in jedem Fall gefunden. Die Messwerte streuen innerhalb des durch $\psi(x)$ beschriebenen Ensembles nicht.

Natürlich gilt dies nicht nur für die Eigenschaft „kinetische Energie“, sondern auch für alle anderen dynamischen Eigenschaften (z. B. Impuls). Zu jeder dynamischen Eigenschaft A gehört ein Operator Â. Man kann entscheiden, ob QO, die durch die Wellenfunktion ψ beschrieben werden, die Eigenschaft A besitzen, indem man die zugehörige Eigenwertgleichung $\hat{A}\psi=a_0\bullet\psi$ betrachtet.

Operator der Gesamtenergie

Mit der Eigenwertgleichung haben wir eine systematische Methode gefunden, um herauszufinden, ob QO eine bestimmte dynamische Eigenschaft besitzen oder nicht. Bisher konnten wir sie nur für einen Operator –den der kinetischen Energie- anwenden. Eine dynamische Eigenschaft, die in der QM eine besonders große Rolle spielt, ist die **Gesamtenergie**. In der klassischen Physik ist die Gesamtenergie E_{ges} die Summe aus kinetischer Energie E_{kin} und potentieller Energie V.

Nun begegnet uns wieder die Frage nach der Gestalt des Operators. Ist diese gefunden und erweist sich als verträglich mit unseren Grundsätzen, dann ist der entscheidende Schritt zur Lösung des physikalischen Problems getan. Wie sieht nun der quantenmechanische Operator für die Gesamtenergie aus?

Auf kinetische Energie präparierte Elektronen durchlaufen nochmals eine Beschleunigungsspannung

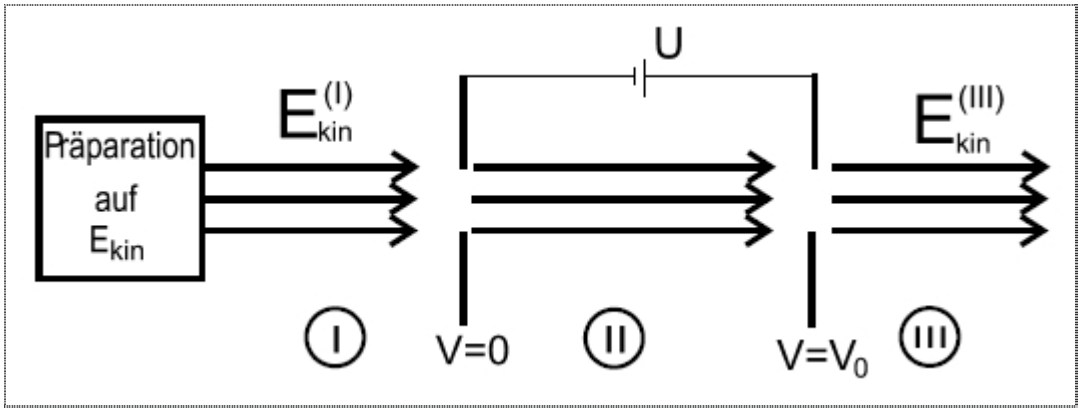


Abbildung 22

Wir betrachten Elektronen, die auf feste kinetische Energie E_{kin}^{I} präpariert worden sind, indem sie z. B. eine Beschleunigungsspannung durchlaufen haben. In der Region I in Abb. 22 besitzen sie diese Eigenschaft. Der Elektronenstrahl durchläuft nun eine weitere Beschleunigungsspannung U (Region II in Abb. 22), so dass die Elektronen anschließend in Region III eine andere kinetische Energie E_{kin}^{III} besitzen.

Potenzialverlauf in den Regionen I – III

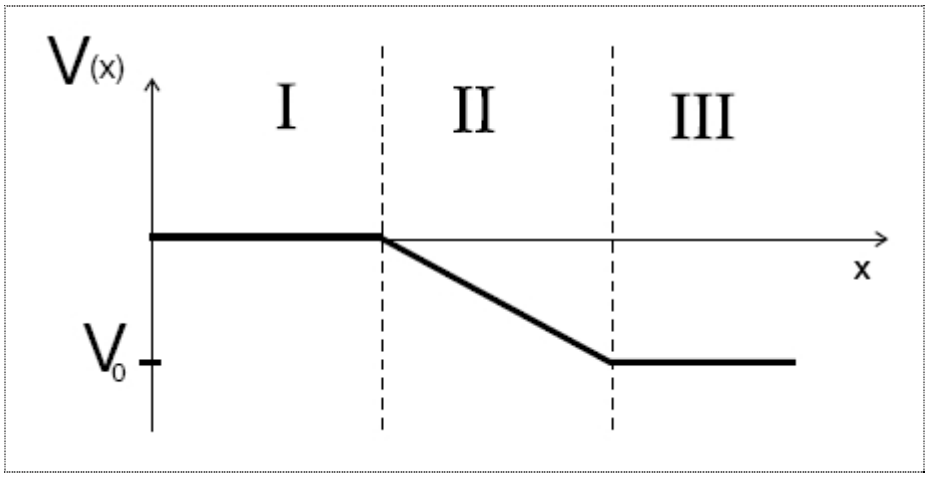


Abbildung 23

In den Regionen I und III hat das Potenzial einen konstanten Wert, denn es wirkt keine Beschleunigungsspannung. Insgesamt gilt:

Region I: Das Potenzial hat den konstanten Wert V(x)=0. Die Elektronen besitzen die Eigenschaft „kinetische Energie“. Ihr Wert ist E_{kin}^{I}.

Region II: Die Elektronen werden durch die angelegte Spannung beschleunigt. Über ihre Eigenschaften lässt sich keine Aussage machen.

Region III: Das Potenzial hat den konstanten Wert *$V(x)=V_0$ mit $V_0>0$*. Da die Beschleunigung durch eine Spannung ein Verfahren zur Präparation der Eigenschaft „kinetische Energie“ darstellt, besitzen die auslaufenden Elektronen in Region III diese Eigenschaft. Ihr Wert ist E_{kin}^{III}.

Mit Hilfe dieser Beziehungen können wir uns die Wellenfunktion von QO in einem konstanten Potenzial (also in Region III) erschließen. Wir nutzen dazu aus, dass die Elektronen sowohl in Region I als auch in Region III die Eigenschaft „kinetische Energie“ besitzen. Die Wellenfunktion für Elektronen mit dieser Eigenschaft ist aber nach Gl. 20 bekannt. In Region III gilt demnach:

$$\psi^{(III)}(x,t) = A \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{2m \cdot E_{Kin}^{(III)}}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T^{(III)}}\right) + ... \qquad (30)$$

(der Einfachheit halber betrachten wir nur den ersten Term von Gl. (20); für den zweiten Term verläuft die Rechnung analog). Nun können wir die kinetische Energie E_{kin}^{III} in dieser Gleichung durch die Gesamtenergie ausdrücken, denn wie in der klassischen Physik gilt nach dem Energieerhaltungssatz $Eges = E_{kin}^{III} + V_0$. Für die kinetische Energie in Region III gilt also:

$$E_{kin}^{III} = E_{ges} - V_0 \qquad (31)$$

Wir können dies in die Wellenfunktion Gl. (30) einsetzen und erhalten als Ergebnis für die Wellenfunktion **für ein Ensemble von Elektronen mit konstantem Potenzial** V_0:

$$\psi^{(III)}(x,t) = A \cdot \sin\left(\frac{\sqrt{2m \cdot (E_{ges} - V_0)}}{\hbar} \cdot x - \frac{2\pi t}{T^{(III)}}\right) + ... \qquad (32)$$

Mit diesem Resultat können wir zur nächsten Frage kommen: Was ist der **Operator der Gesamtenergie**? Gesucht ist ein Operator, der bei Anwendung auf die Wellenfunktion Gl. (32) den Wert der Gesamtenergie liefert. Um den Operator für die kinetische Energie zu finden, haben wir die Wellenfunktion zweimal differenziert. Versuchen wir mit ψ^{III} das gleiche, ergibt sich:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi^{(III)} = -\frac{2m}{\hbar^2} \cdot (E_{ges} - V_0) \cdot \psi^{(III)} \qquad (33)$$

Multiplikation mit $-\hbar^2 / 2m$ liefert:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2}\psi^{(III)} = (E_{ges} - V_0) \cdot \psi^{(III)} \qquad (33a)$$

Bringt man noch den Term $V_0 \bullet \psi^{III}$ auf die linke Seite, hat die Gleichung die gewünschte Form. Da für V_0 beliebige Werte eingesetzt werden können, setzen wir $V_0 = V(x)$ und erhalten nunmehr die gesuchte **Schrödinger- Gleichung**.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2}\psi E_{ges}(x) + V(x) \cdot \psi E_{ges}(x) = E_{ges} \cdot \psi E_{ges}(x) \qquad (34)$$

Diese Eigenwertgleichung für die Gesamtenergie ist eine der wichtigsten Gleichungen in der QM. Sie heißt **Schrödinger-Gleichung**. Sie hat in der QM eine Bedeutung, die mit der Newton'schen Gleichung in der klassischen Mechanik vergleichbar ist. Der **Operator für die Gesamtenergie** ist:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2}\psi E_{ges}(x) + V(x) \qquad (35)$$

Er setzt sich aus dem Operator der kinetischen Energie und dem Operator der potenziellen Energie zusammen: $\hat{E}_{ges} = \hat{E}_{kin} + \hat{E}_{pot}$. Dabei entspricht der Operator $\hat{E}_{pot}$ einfach der Multiplikation der Wellenfunktion $\psi(x)$ mit $V(x)$.

Damit haben wir die gestellte Aufgabe, nämlich Einstieg in die QM mit Herleitung der Schrödinger- Gleichung, erfüllt. Bzgl. des Umgangs mit dieser Gleichung bzw. deren Anwendung auf Fallbeispiele wird auf die Literatur bzw. Teil II „Anwendung der Schrödinger- Gleichung" verwiesen.