

Kapitel 2

Wellenmechanik

Der Gedanke, dass ein in einem Strahl ausgesetztes Elektron aus freiem Entschluss den Augenblick und die Richtung wählt, in der es fortspringen will, ist mir unerträglich. Wenn schon, dann möchte ich lieber Schuster oder gar Angestellter in einer Spielbank sein als Physiker.

A. Einstein; Nobelpreis 1921

2.1 Unbestimmtheitsprinzip für materielle Teilchen

Wir wollen uns davon überzeugen, dass die Unbestimmtheitsrelationen für Lichtquanten und der für die Kollisionen zwischen Photonen und geladenen Teilchen vorausgesetzte Energie-Impulssatz uns zwingen, Unbestimmtheitsrelationen auch für materielle Teilchen als gültig anzusehen. Daraus werden wir auf die Teilchen-Welle-Doppelnatur der Materie schließen. Als Folge werden wir auf die eindeutige Objektivierbarkeit der Naturvorgänge verzichten müssen, und die Naturgesetze werden die Form statistischer Gesetze annehmen.

Die Unbestimmtheitsrelationen für materielle Teilchen werden dieselbe Form wie diejenigen für Lichtquanten annehmen,

$$\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim \hbar \quad \text{und} \quad \Delta x^j \cdot \Delta p_j \gtrsim \hbar, \quad (2.1)$$

und wir werden sehen, dass sie aus den de Broglieschen Relationen

$$E = \hbar\omega \quad \text{und} \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (2.2)$$

und der Teilchen-Welle-Doppelnatur des Lichts folgen.

2.1.1 Orts- und Impulsmessung von Teilchen

Wir wollen analysieren, ob es möglich ist, den Zustand eines Teilchens zu einer bestimmten Zeit durch gleichzeitige Angabe seines Ortes und Impulses zu charakterisieren. Wir versuchen zuerst den Ort durch Lichtstreuung zu bestimmen. Die Frequenz des einfallenden Lichts sei ν und die des gestreuten Lichts sei ν' . Wir detektieren die gestreute Lichtwelle mit einem Mikroskop, einer photographischen Platte oder einem Zählrohr.

Ortsmessung: Nach der Abbeschen Theorie nimmt das Auflösungsvermögen eines Mikroskops und damit die Genauigkeit der Ortsmessung des Teilchens in Abbildung (2.1) mit zunehmender Wellenlänge ab. Ein Mikroskop kann Objekte bis zu einer Größe $\Delta x_{\text{Teilchen}}$ auflösen, die bei einem Öffnungswinkel θ und einer Strahlungswellenlänge λ' durch die Beziehung

$$\Delta x_{\text{Teilchen}} \sim \frac{\lambda'}{\sin \theta} \quad (2.3)$$

gegeben ist¹. Für eine genaue Ortsbestimmung ist eine kurze Wellenlänge λ' und ein großer

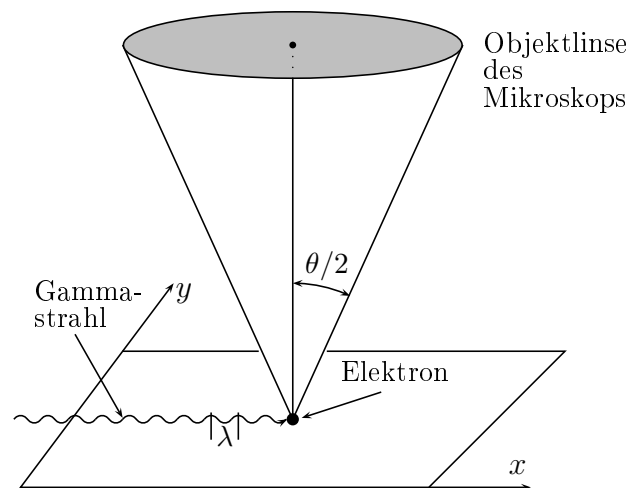


Abbildung 2.1: Das Gammastrahl-Mikroskop von Heisenberg als Gedankenexperiment.

Öffnungswinkel θ wünschenswert.

¹HEISENBERG hat bei seinem Promotionsrigorosum 1923 gerade auf die von Wien gestellte Frage nach dem Auflösungsvermögen des Mikroskops nicht antworten können.

Impulsmessung: Die Richtung des gestreuten Lichts ist innerhalb des Öffnungswinkel θ unbestimmt. Seine Impulsunschärfe ist demnach $\Delta p_{\text{Photon}} \sim \hbar \Delta k' \sim h \sin \theta / \lambda'$. Aufgrund der Impulserhaltung ist der Impuls des streuenden Teilchens nach dem Streuprozess dann auch nur bis auf einen Fehler der Größe

$$\Delta p_{\text{Teilchen}} \sim \Delta p_{\text{Photon}} \sim \frac{h}{\lambda'} \sin \theta$$

bekannt. Für eine genaue Impulsmessung braucht es eine große Wellenlänge λ' und einen kleinen Öffnungswinkel θ . Für das Produkt von Orts- und Impulsunschärfe finden wir

$$\Delta p_{\text{Teilchen}} \cdot \Delta x_{\text{Teilchen}} \gtrsim h.$$

Zeitmessung: Der Zeitpunkt der Streuung ist bis auf einen Fehler der Größe

$$\Delta t \geq \frac{1}{\nu'} = \frac{\lambda'}{c}. \quad (2.4)$$

bestimmbar. Daraus folgt, dass der Zeitpunkt scharf bestimmbar wird im Grenzfall $\nu' \rightarrow \infty$. Nun kann die Wellenlänge λ' des gestreuten Lichts aber nicht beliebig klein sein. Nach der Theorie des Compton-Effekts ist die Wellenlänge der gestreuten Photonen größer als die Wellenlänge der einlaufenden Photonen,

$$\lambda' = \lambda + \frac{2h}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2},$$

und für $\theta \sim \pi/2$ größer gleich der Compton-Wellenlänge des streuenden Elektrons. Die Zeitauflösung ist also beschränkt durch

$$\Delta t \geq \frac{\lambda_c}{c}, \quad \lambda_c = \frac{h}{m_e c}.$$

Wir folgern, dass im *nicht-relativistischen Grenzfall* ($c \rightarrow \infty$, schwere Teilchen) der Zeitpunkt einer Ortsmessung und der Teilchenort genau messbar sind. Deswegen ist folgende *Grundannahme* natürlich:

Für jeden Zustand eines Teilchens kann man zu jedem Zeitpunkt eine Wahrscheinlichkeit $w(t, \mathbf{x})d^3x$ dafür angeben, bei einer Messung des Teilchenorts diesen innerhalb einer kleinen Umgebung des Punktes \mathbf{x} vom Volumen d^3x zu finden. Zu jeder Zeit muss die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen irgendwo zu

finden, gleich Eins sein:

$$\int w(t, \mathbf{x}) d^3x = 1, \quad \forall t.$$

Diese Grundannahme gilt nur im nichtrelativistischen Grenzfall - also nicht für Photonen - und ist insbesondere keine direkte Folge der Unbestimmtheitsrelationen. Im nichtrelativistischen Limes kommen in der Grundannahme Zeit und Ort nicht symmetrisch vor.

Eine analoge Grundannahme kann auch für Messungen eines Teilchenimpulses gemacht werden. Ein Gedankenexperiment ähnlich dem soeben beschriebenen zeigt, dass im nichtrelativistischen Grenzfall $c \rightarrow \infty$ der Teilchenimpuls in beliebig kurzer Zeit beliebig genau bestimmt werden kann, allerdings unter Einhaltung der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation. Also fordern wir

Man kann für jeden Zustand eines Teilchens im nichtrelativistischen Grenzfall eine Wahrscheinlichkeit $\tilde{w}(t, \mathbf{p}) d^3p$ dafür angeben, bei einer Messung des Teilchenimpulses diesen in einer kleinen Umgebung von \mathbf{p} mit Volumen d^3p zu finden. Man findet mit Sicherheit irgendeinen Impuls,

$$\int \tilde{w}(t, \mathbf{p}) d^3p = 1, \quad \forall t.$$

Da w und \tilde{w} die Wahrscheinlichkeitsdichten für den Ort und Impuls des Teilchens sind, sind der mittlere Aufenthaltsort und der mittlere Impuls zur Zeit t gleich

$$\langle \mathbf{x} \rangle_t = \int \mathbf{x} w(t, \mathbf{x}) d^3x \quad \text{und} \quad \langle \mathbf{p} \rangle_t = \int \mathbf{p} \tilde{w}(t, \mathbf{p}) d^3p. \quad (2.5)$$

Die Mittelwerte von Funktionen des Ortes oder des Impulses berechnen sich gemäß

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle_t = \int f(\mathbf{x}) w(t, \mathbf{x}) d^3x \quad \text{und} \quad \langle g(\mathbf{p}) \rangle_t = \int g(\mathbf{p}) \tilde{w}(t, \mathbf{p}) d^3p. \quad (2.6)$$

Im folgenden Abschnitt werden wir die Wahrscheinlichkeitsdichten w und \tilde{w} charakterisieren und angeben, wie sie sich mit der Zeit ändern. Wegen der Unbestimmtheitsrelation sollten w und \tilde{w} korreliert sein.

2.2 Materiewellen für kräftefreie Teilchen

Wir wollen nun kräftefreie Teilchen quantenmechanisch so beschreiben, dass die Unbestimmtheitsrelationen und die eben formulierten Grundannahmen, d.h. die Existenz von $w(t, \mathbf{x})$ und $\tilde{w}(t, \mathbf{p})$, automatisch erfüllt sind. Die Ideen von de BROGLIE, seine Relationen

$$E = \hbar\omega \quad \text{und} \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (2.7)$$

und die Versuche von DAVISSON und GERMER sowie STERN und Mitarbeiter legen nahe, eine *Wellentheorie* der Teilchen zu konstruieren.

Relativistische Teilchen: Aus der relativistischen Mechanik ist folgende Beziehung zwischen Energie und Impuls bekannt,

$$\frac{E}{c} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2c^2} \quad \text{und} \quad \mathbf{v} = \frac{c^2}{E} \mathbf{p} = \nabla_{\mathbf{p}} E. \quad (2.8)$$

Mit den de Broglie-Beziehungen folgt die entsprechende Beziehung zwischen Kreisfrequenz und Wellenzahlvektor,

$$\frac{\omega(\mathbf{k})}{c} = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2c^2/\hbar^2} \quad \text{und} \quad \mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{k}} \omega = \frac{c^2}{\omega} \mathbf{k}. \quad (2.9)$$

Die Teilchengeschwindigkeit ist gleich der *Gruppengeschwindigkeit* und für massive Teilchen kleiner c . Dagegen ist die *Phasengeschwindigkeit* größer als die Lichtgeschwindigkeit,

$$u = \frac{\omega}{|\mathbf{k}|} = \frac{c^2}{|\mathbf{v}|} > c.$$

Wir stellen uns die Materiewelle als Überlagerung von monochromatischen Wellen vor: Das Wellenpaket ψ habe also die Form

$$\begin{aligned} \psi(t, \mathbf{x}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{R^3} \tilde{\psi}(t, \mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} d^3p \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{R^3} \tilde{\psi}(0, \mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x} - Et)/\hbar} d^3p \end{aligned} \quad (2.10)$$

mit Dispersionsrelation $E(\mathbf{p})$. Nach der Umkehrformel der Fouriertransformationen ist

$$\tilde{\psi}(t, \mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{R^3} \psi(t, \mathbf{x}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} d^3x, \quad (2.11)$$

und wegen der Parsevalschen Gleichung sind dann die Integrale

$$\int d^3x |\psi(t, \mathbf{x})|^2 = \int d^3p |\tilde{\psi}(t, \mathbf{p})|^2 = \int d^3p |\tilde{\psi}(0, \mathbf{p})|^2 \quad (2.12)$$

zeitunabhängig. Wir können das letzte Integral gleich 1 wählen. Diese Normierung bleibt dann zu allen Zeiten erhalten. Dies legt nun nahe, in den Grundannahmen des vorherigen Abschnitts

$$w(t, \mathbf{x}) = |\psi(t, \mathbf{x})|^2 \quad \text{und} \quad \tilde{w}(t, \mathbf{p}) = |\tilde{\psi}(t, \mathbf{p})|^2 \quad (2.13)$$

zu setzen. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion im Ortsraum ist dann die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum und das Betragsquadrat ihrer Fouriertransformierten die Wahrscheinlichkeitsdichte im Impulsraum.

Diese auf M.BORN zurückgehende Identifikation [40] kann durch folgende Betrachtungen weiter plausibel gemacht werden. Falls (2.13) gilt, finden wir für den mittleren Aufenthaltsort eines Teilchens zur Zeit t

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \rangle_t &= \int \mathbf{x} |\psi(t, \mathbf{x})|^2 d^3x = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) \mathbf{x} \left\{ \int \tilde{\psi}(t, \mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} d^3p \right\} d^3x \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) \left\{ \int \tilde{\psi}(t, \mathbf{p}) \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} d^3p \right\} d^3x. \end{aligned}$$

Wir wollen annehmen, dass die Wellenfunktion und ihre Fourier-Transformierte im Unendlichen genügend schnell abfallen. Dann dürfen wir partiell integrieren, ohne Oberflächenterme aufzusammeln, und finden

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \rangle_t &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) \left\{ \int e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\psi}(t, \mathbf{p}) d^3p \right\} d^3x \\ &= \int \tilde{\psi}(t, \mathbf{p}) i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\psi}(t, \mathbf{p}) d^3p. \end{aligned}$$

Mit der Zeitabhängigkeit

$$\tilde{\psi}(t, \mathbf{p}) = e^{-iEt/\hbar} \tilde{\psi}(0, \mathbf{p})$$

folgt dann unmittelbar die Zeitabhängigkeit für den mittleren Ort,

$$\langle \mathbf{x} \rangle_t = \langle \mathbf{x} \rangle_0 + t \int \frac{\partial E(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \tilde{w}(0, \mathbf{p}) d^3p = \langle \mathbf{x} \rangle_0 + t \langle \mathbf{v}_{\text{Gruppe}} \rangle_0. \quad (2.14)$$

Also bewegt sich im Mittel das Teilchen gleichmäßig und geradlinig. Der Erwartungswert

des Ortes genügt damit dem Newtonschen Bewegungsgesetz der klassischen Mechanik. Aus (2.13) folgen auch sofort die Unbestimmtheitsrelationen zwischen Ort und Impuls (siehe erstes Kapitel). Schließlich ist $|\psi(t, \mathbf{x})|^2$ der einzige in $\psi, \bar{\psi}$ quadratische Ausdruck, dessen Integral über \mathbf{x} unabhängig von der Zeit ist.

Nun kehren wir zur Gleichung (2.10) zurück. Man sieht sofort, dass $\psi(t, \mathbf{x})$ die Wellengleichung

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2}{c^2 \partial t^2} - \Delta \right) \psi(t, \mathbf{x}) &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \tilde{\psi}(0, \mathbf{p}) \left(\frac{-E^2 + \mathbf{p}^2 c^2}{\hbar^2 c^2} \right) e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)/\hbar} d^3 p \\ &\stackrel{(2.8)}{=} -\frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \psi(t, \mathbf{x}), \end{aligned}$$

also die sogenannte *Klein-Gordon-Gleichung*

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (2.15)$$

erfüllt. Diese relativistische Wellengleichung wurde zuerst von DE BROGLIE zur Beschreibung von Elektronen vorgeschlagen. Neben der Lösung (2.10) hat die Klein-Gordon-Gleichung allerdings auch Lösungen mit negativer Energie

$$E(\mathbf{p}) = -c\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2 c^2}.$$

Es gibt also Lösungen der Klein-Gordon-Gleichung mit beliebig negativer Energie. Das ist physikalisch unsinnig. Auch SCHRÖDINGER glaubte anfänglich, dass die Klein-Gordon-Gleichung im Coulombpotential die Wellengleichung für das Elektron im Wasserstoffatom sei. Es hat sich aber schnell herausgestellt, dass diese Wellengleichung die *Feinstruktur* des Wasserstoffspektrums nicht erklären konnte.

Nichtrelativistische Teilchen: Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass die im letzten Abschnitt getroffenen Grundannahmen, wie dort bereits angedeutet, in einer relativistischen Theorie nicht gültig sein werden. Darum gehen wir zur *nichtrelativistischen Näherung* über und übernehmen aus der klassischen nichtrelativistischen Mechanik die Beziehung zwischen Impuls und Geschwindigkeit,

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k} \quad , \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}_{\text{Gruppe}} = \frac{\partial\omega(\mathbf{k})}{\partial\mathbf{k}}. \quad (2.16)$$

Daraus folgt der Zusammenhang zwischen Kreisfrequenz und Wellenzahlvektor

$$m \frac{\partial \omega(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = \hbar \mathbf{k} \implies \omega(\mathbf{k}) = \frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m} \quad \text{oder} \quad E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}. \quad (2.17)$$

Mit dieser nichtrelativistischen Dispersionsrelation erfüllt ein *Wellenpaket*

$$\psi(t, \mathbf{x}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \tilde{\psi}(0, \mathbf{p}) e^{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - E(\mathbf{p})t)/\hbar} d^3p \quad (2.18)$$

die zeitabhängige *Schrödinger-Gleichung* für ein kräftefreies Teilchen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t, \mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(t, \mathbf{x}). \quad (2.19)$$

Wiederum ist $\int d^3x |\psi(t, \mathbf{x})|^2$ zeitunabhängig, $\langle \mathbf{x} \rangle_t$ erfüllt das klassische Galileische Gesetz und die Unschärferelationen gelten. Die explizite Form der Dispersionsrelation $\omega(\mathbf{k})$ geht in deren Beweis ja nicht ein.

Löst $\psi(t, \mathbf{x})$ die Schrödinger-Gleichung (2.19), so ist auch

$$\psi_T(t, \mathbf{x}) \equiv \bar{\psi}(-t, \mathbf{x})$$

eine Lösung. Daraus folgt die *Zeitumkehrinvarianz*, ähnlich wie in der klassischen Mechanik. Weiterhin ist selbst für reelle Anfangsbedingungen die Lösung $\psi(t, \mathbf{x})$ zu späteren Zeiten nicht mehr reell. Daraus folgt schon, dass ψ selbst nicht beobachtbar ist.

2.2.1 Allgemeine Lösung der freien Schrödingergleichung

Wir konstruieren nun die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.19) für beliebige Anfangsbedingungen. Dazu untersuchen wir das Anfangswertproblem

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi \quad \text{mit} \quad \psi(0, \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}). \quad (2.20)$$

Im ersten Schritt lösen wir das Problem für die spezielle Anfangsbedingung

$$\psi_0(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad (2.21)$$

wobei δ die 3-dimensionale Diracsche δ -Distribution ist. Wir bezeichnen die entsprechende, von \mathbf{y} abhängige partikuläre Lösung mit $K(t, \mathbf{x}, \mathbf{y})$. Da

$$\psi_0(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \stackrel{(2.11)}{\implies} \tilde{\psi}(0, \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{y}} \quad (2.22)$$

ist, ergibt sich mit (2.10) und $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ folgende Form für die partikuläre Lösung

$$K(t, \mathbf{x}, \mathbf{y}) = (2\pi)^{-3} \int e^{i[\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y}) - \hbar\mathbf{k}^2 t/2m]} d^3k.$$

Nun setzen wir $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$ und ergänzen quadratisch

$$\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\xi} - \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}t = - \left(\hbar\mathbf{k} - \frac{m}{t}\boldsymbol{\xi} \right)^2 \frac{t}{2m\hbar} + \frac{m}{2t\hbar}\boldsymbol{\xi}^2.$$

Nach Einführung der Variablen $\mathbf{q} = \hbar\mathbf{k} - m\boldsymbol{\xi}/t$ findet man

$$K(t, \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{im(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2/2t\hbar} \int e^{-it\mathbf{q}^2/2m\hbar} d^3q.$$

Ersetzen wir \mathbf{q} durch $\mathbf{q} = (1 - i\epsilon)\mathbf{l}$, $\epsilon > 0$, so konvergiert das Gaußsche Integral, und wir finden für $\epsilon \rightarrow 0$ das Resultat

$$K(t, \mathbf{x} - \mathbf{y}) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t} \right)^{3/2} e^{im(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2/2\hbar t}. \quad (2.23)$$

Die allgemeine Lösung der linearen Schrödinger-Gleichung (2.20) mit $\psi(0, \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x})$ ergibt sich nun aus (2.23) durch Überlagerung der partikulären Lösungen wie folgt,

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^3} K(t, \mathbf{x} - \mathbf{y}) \psi_0(\mathbf{y}) d^3y. \quad (2.24)$$

2.2.2 Zerfließen von Wellenpaketen

Ein anfänglich lokalisiertes Wellenpaket ψ_0 zerfließt mit fortschreitender Zeit. Dies folgt unmittelbar aus der Darstellung (2.24), wenn wir annehmen, dass $|\psi_0(\mathbf{y})|$ integrierbar ist. Dann gilt wegen $|\int fg| \leq \int |f| |g|$ die Abschätzung

$$|\psi(t, \mathbf{x})| \leq \int |K(t, \mathbf{x} - \mathbf{y})| |\psi_0(\mathbf{y})| d^3y = \left(\frac{m}{2\pi\hbar t} \right)^{3/2} \int |\psi_0(\mathbf{y})| d^3y = \frac{C}{t^{3/2}}, \quad (2.25)$$

mit einer für uns unbedeutenden Konstanten C . Also nimmt die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum mit der dritten Potenz der Zeit ab,

$$w(t, \mathbf{x}) = |\psi(t, \mathbf{x})|^2 \leq \frac{C^2}{t^3}. \quad (2.26)$$

Ist das Teilchen zum Zeitpunkt t in einem Gebiet mit Volumen $\Delta V(t)$ lokalisiert, so wächst wegen

$$1 = \int w(t, \mathbf{x}) d^3x \sim \bar{w}(t) \Delta V(t) \stackrel{(2.26)}{\sim} \frac{\sigma^3(t)}{t^3}$$

die Breite σ des Wellenpakets linear mit der Zeit an. Die Abnahme (2.26) ist also in Übereinstimmung mit der Geometrie des \mathbb{R}^3 .

Teilchen auf einer Geraden oder Ebene: In einer Dimension erwarten wir wegen

$$1 \sim \bar{w}(t)\sigma(t) \sim \bar{w}(t)t \implies w(t) \sim \frac{1}{t},$$

dass die Wahrscheinlichkeitsdichte an jedem Ort mit $1/t$ gegen Null strebt. Mit

$$\int d\xi e^{im\xi^2/2\hbar t} = \left(\frac{2\pi i\hbar t}{m} \right)^{1/2}$$

erhält man in der Tat nach Integration über die Koordinaten y^2 und y^3 in (2.24) für eine anfänglich nur von der ersten Koordinate abhängige Wellenfunktion die Lösung

$$\psi(t, x^1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} \int e^{im(x^1-y^1)^2/2\hbar t} \psi_0(y^1) dy^1 \quad (2.27)$$

und für eine anfänglich nur von x^1 und x^2 abhängige Wellenfunktion

$$\psi(t, x^1, x^2) = \frac{m}{2\pi i\hbar t} \int e^{im[(x^1-y^1)^2+(x^2-y^2)^2]/2\hbar t} \psi_0(y^1, y^2) dy^1 dy^2. \quad (2.28)$$

Die Funktionen $\psi(t, x^1)$ und $\psi(t, x^1, x^2)$ sind Lösungen der Schrödinger-Gleichung (2.19), wobei Δ der Laplace-Operator in einer und zwei Dimensionen ist. Damit hängen die Lösungen der freien Schrödinger-Gleichung nur von denselben Koordinaten ab wie die anfängliche Wellenfunktion ψ_0 . Genau wie im dreidimensionalen Fall beweist man

$$\begin{aligned} |\psi(t, x^1)| &\leq \frac{C}{\sqrt{t}} \quad \text{in einer Dimension} \\ |\psi(t, x^1, x^2)| &\leq \frac{C}{t} \quad \text{in zwei Dimensionen.} \end{aligned} \quad (2.29)$$

Die Wellenfunktion kann nur in eine oder zwei Dimensionen entweichen und zerfließt deshalb langsamer als in drei Dimensionen.

Zerfließen eines Gaußschen Wellenpakets: Wir untersuchen hier das Zerfließen eines Gaußschen Wellenpakets etwas näher. Dazu brauchen wir das folgende n -dimensionale Gaußsche Integral, das auch bei vielen anderen Untersuchungen auftritt:

$$\int d^n x \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}, A\mathbf{x}) + (\mathbf{j}, \mathbf{x})\right) = \frac{(2\pi)^{n/2}}{\sqrt{\det A}} \exp\left(\frac{1}{2}(\mathbf{j}, A^{-1}\mathbf{j})\right), \quad A = (A_{ij}). \quad (2.30)$$

Die Eigenwerte der symmetrischen $n \times n$ -Matrix A dürfen keinen negativen Realteil haben. Gemäß dieser Formel ist die Gaußsche Wellenfunktion

$$\psi_0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\det^{1/4}(2\pi\sigma^2)} \exp\left(-\frac{1}{4}(\mathbf{x}, \sigma^{-2}\mathbf{x})\right), \quad (2.31)$$

wobei σ^2 eine symmetrische, reelle und positive Matrix ist, auf Eins normiert. Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w(0, \mathbf{x}) = |\psi_0(\mathbf{x})|^2 = \frac{1}{\det^{1/2}(2\pi\sigma^2)} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}, \sigma^{-2}\mathbf{x})\right)$$

ist eine am Ursprung konzentrierte Gauß-Verteilung der 'Breite' σ . Nun können wir mit Hilfe von (2.24, 2.23) und (2.30) die Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung (2.19) mit Anfangsbedingung ψ_0 berechnen. Man findet

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{\det^{1/4}(2\pi\sigma^{-2}B^2)} \exp\left(-\frac{1}{4}(\mathbf{x}, B^{-1}\mathbf{x})\right), \quad \text{wobei} \quad B = \sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m} \quad (2.32)$$

bezeichnet. Für die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum erhalten wir

$$|\psi(t, \mathbf{x})|^2 = \frac{1}{\det^{1/2}(2\pi\sigma^2(t))} \exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}, \sigma^{-2}(t)\mathbf{x})\right), \quad \sigma^2(t) = \sigma^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} \sigma^{-2}. \quad (2.33)$$

Wächst t von $-\infty$ bis 0, so nimmt die Breite des Pakets $\sigma(t)$ ab und erreicht für $t = 0$ ihr Minimum σ . Danach wird sie ständig größer: Das Wellenpaket zerfließt wie in der Abbildung (2.2) skizziert.

2.2.3 Impulsoperator

In diesem Abschnitt finden wir die wichtigen *Korrespondenzregeln* im Ortsraum. Dazu berechnen wir den mittleren Impuls eines Teilchens mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichte

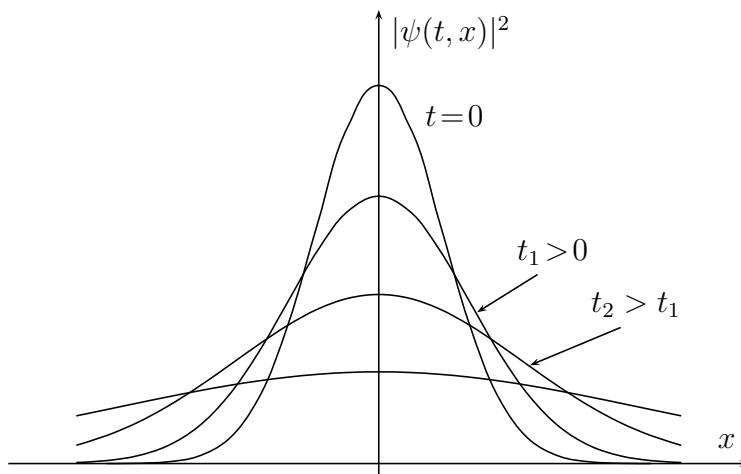


Abbildung 2.2: Mit der Zeit verbreitert sich das Gaußsche Wellenpaket.

im Impulsraum. Aus (2.13) und (2.11) folgt

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} \rangle_\psi &= \int \mathbf{p} \tilde{w}(t, \mathbf{p}) d^3 p = \int \bar{\tilde{\psi}}(t, \mathbf{p}) \mathbf{p} \tilde{\psi}(t, \mathbf{p}) d^3 p \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 p \int d^3 x \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \mathbf{p} \int d^3 y \psi(t, \mathbf{y}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{y}/\hbar}.\end{aligned}\quad (2.34)$$

Hier können wir \mathbf{p} durch $i\hbar\nabla_y$, angewandt auf die letzte Exponentialfunktion, ersetzen. Nach einer partiellen Integration unter dem \mathbf{y} -Integral ergibt sich der mittlere Impuls

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p} \rangle_\psi &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3 x d^3 y \int d^3 p e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x}-\mathbf{y})/\hbar} \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) \frac{\hbar}{i} \nabla_y \psi(t, \mathbf{y}) \\ &= \int d^3 x \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) \frac{\hbar}{i} \nabla_x \psi(t, \mathbf{x}),\end{aligned}\quad (2.35)$$

wobei wir (2.22) benutzten. Ganz analog schließt man, dass für eine beliebige Funktion $f(\mathbf{p})$ des Impulses der Erwartungswert durch

$$\langle f(\mathbf{p}) \rangle_\psi = \int d^3 x \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) f\left(\frac{\hbar}{i} \nabla_x\right) \psi(t, \mathbf{x}) \quad (2.36)$$

gegeben ist. Also wird im Ortsraum der Impuls durch den Ableitungsoperator dargestellt,

$$\mathbf{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla_x. \quad (2.37)$$

Wegen der Schrödinger-Gleichung berechnet sich die mittlere Energie eines freien Teilchens gemäß

$$\begin{aligned}\langle E \rangle_\psi &= \frac{1}{2m} \langle \mathbf{p}^2 \rangle_\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \int d^3x \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) \Delta \psi(t, \mathbf{x}) \\ &\stackrel{(2.19)}{=} \int d^3x \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) (i\hbar \partial_t) \psi(t, \mathbf{x}),\end{aligned}$$

und wir folgern, dass die Energie durch die Ableitung nach der Zeit dargestellt wird

$$E \longrightarrow i\hbar \partial_t. \quad (2.38)$$

Da weiter $w(t, \mathbf{x})$ die Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum ist, ist der Mittelwert einer beliebigen Funktion des Teilchenorts

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \int d^3x \bar{\psi}(t, \mathbf{x}) f(\mathbf{x}) \psi(t, \mathbf{x}). \quad (2.39)$$

Die soeben gefundenen Vorschriften

$$\begin{array}{ll} \text{Energie} & E \longrightarrow i\hbar \partial_t \\ \text{Ort} & \mathbf{x} \longrightarrow \mathbf{x} \\ \text{Impuls} & \mathbf{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla_x \end{array} \quad (2.40)$$

sind die wichtigen *Korrespondenzregeln* im Ortsraum. Die klassische Hamilton-Funktion eines nichtrelativistischen freien Teilchens ist $H_0 = \mathbf{p}^2/2m$. Unter Benutzung der Korrespondenzregeln schreibt sich die Schrödinger-Gleichung (2.19) gemäß

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, \mathbf{x})}{\partial t} = H_0(\mathbf{p}) \psi(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla_x. \quad (2.41)$$

In dieser Form erweist sich die Schrödinger-Gleichung als verallgemeinerbar. Man kann sie *nicht deduktiv ableiten*. Ihre Rechtfertigung besteht in der Übereinstimmung ihrer Vorhersagen mit den experimentell gewonnenen Ergebnissen. Nichtsdestoweniger wird die Wahl der Wellengleichung durch die Deutung von ψ als Wahrscheinlichkeitsamplitude durch a priori-Bedingungen eingeschränkt:

- Die Wellengleichung muss *linear* und *homogen* sein. Die Welle besitzt dann die für Wellen charakteristische Superpositionseigenschaft, entsprechend der die Linearkombination $\alpha_1 \psi_1 + \alpha_2 \psi_2$ zweier Lösungen wieder eine Lösung der Gleichung ist. Wir haben diese Eigenschaft bei der Fourierdarstellung von ψ benutzt.

- Sie muss eine Differentialgleichung *erster Ordnung in der Zeit* sein. Dann reicht die Kenntnis der Funktion ψ zu einem gegebenen Zeitpunkt aus, um ihre spätere Entwicklung zu bestimmen. Das entspricht der Forderung, dass der Zustand des physikalischen Systems vollständig durch die einmal gegebene ψ -Funktion bestimmt sein soll. Die relativistische Klein-Gordon-Gleichung erfüllt diese Forderung nicht.

2.3 Wellenmechanik mit Kräften

Nach dem Studium von freien Teilchen untersuchen wir nun die Dynamik von Teilchen, welche Potentialkräften ausgesetzt sind. Das betrachtete Potential $V(\mathbf{x})$ sei vorerst schwach ortsabhängig. Klassisch gilt der Energiesatz

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) = \text{konstant}, \quad (2.42)$$

den wir nach dem Impulsbetrag auflösen,

$$|\mathbf{p}| \equiv |\mathbf{p}(\mathbf{x})| = \sqrt{2m(E - V(\mathbf{x}))}. \quad (2.43)$$

Für schwach veränderliche Potentiale ist der Betrag des ortsabhängigen Impulses quasi-konstant. Wir nehmen weiter an, dass auch seine Richtung $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ quasi-konstant sei, was wir durch Lösung der Hamiltonschen Gleichungen

$$\dot{\mathbf{x}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \quad (2.44)$$

bestätigen können. Nach de Broglie beschreiben wir jedes Teilchen durch eine 'monochromatische Welle'

$$\begin{aligned} \psi(t, \mathbf{x}) &= \exp(i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)/\hbar) \\ &= \exp\left(i\left\{\sqrt{2m(E - V(\mathbf{x}))} \mathbf{n}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x} - Et\right\}/\hbar\right) \end{aligned}$$

beschreiben. Vernachlässigen wir die Ortsabhängigkeit des Potentials V und Einheitsvektors \mathbf{n} , so ergeben sich

$$i\hbar\partial_t\psi(t, \mathbf{x}) \sim E\psi(t, \mathbf{x}), \quad \Delta\psi(t, \mathbf{x}) \sim -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\mathbf{x}))\psi(t, \mathbf{x}).$$

Ersetzen wir \sim durch ein Gleichheitszeichen, dann finden wir die im Zentrum dieser Vorlesung stehende zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, \mathbf{x})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta \psi)(t, \mathbf{x}) + V(\mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x}), \quad (2.45)$$

von der wir annehmen wollen, dass sie auch für schnell variierende Potentiale Gültigkeit habe.

Offensichtlich hat die Schrödinger-Gleichung die Form

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, \mathbf{x})}{\partial t} = H(\mathbf{p}, \mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x}), \quad \text{wobei} \quad \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (2.46)$$

der Impulsoperator im Ortsraum ist, siehe (2.40). ERWIN SCHRÖDINGER veröffentlichte 1926 eine Reihe von Arbeiten, wovon vier den Titel '*Quantisierung als Eigenwertproblem*' tragen [42]. Der von SCHRÖDINGER gewählte Weg über die von HAMILTON angegebene Formulierung der Mechanik war voller Hindernisse. Der Weg zu seiner berühmten zeitunabhängigen Wellengleichung

$$\Delta \psi = \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi \quad (2.47)$$

für ein Elektron im Feld des Wasserstoffatomkerns war in seiner ersten Arbeit noch wenig durchsichtig. Diesem Punkt war der größte Teil seiner zweiten Arbeit gewidmet.

2.3.1 Von der klassischen Mechanik zur Wellenmechanik

Ähnlich wie die Strahlenoptik der Grenzfall der Wellenoptik für kleine Wellenlängen ist, sollte auch die klassische Mechanik als Grenzfall einer neuen Mechanik, der Wellenmechanik verstanden werden. Wir wollen diesen zentralen Schrödingerschen Gedankengang rekapitulieren. Dazu wiederholen wir zuerst die Grundidee der Hamilton-Jacobi Theorie.

Es seien $(q^1, \dots, q^N) \equiv q$ die verallgemeinerten Koordinaten eines klassischen mechanischen Systems mit Lagrangefunktion $L(q, \dot{q}, t)$. Zum Beispiel können (q^1, q^2, q^3) die kartesischen Koordinaten eines Teilchens oder aber dessen Polarkoordinaten sein. Sei weiter

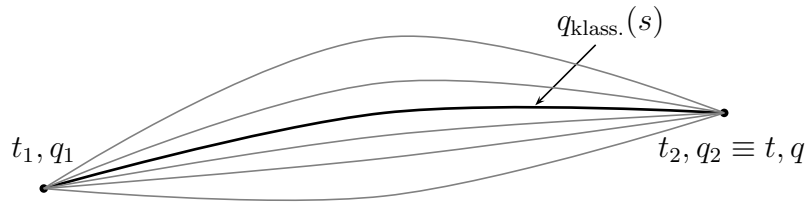
$$S = \int L(t, q, \dot{q}) dt \quad (2.48)$$

die Wirkung einer Bahn $q(t)$ im Konfigurationsraum. Die Variation der Wirkung berechnet

sich zu

$$\begin{aligned}\delta S &= \int (L_{,q} \delta q + L_{,\dot{q}} \delta \dot{q} + L_{,t} \delta t) dt \\ &= \int \left(\left\{ L_{,q} - \frac{d}{dt} L_{,\dot{q}} \right\} \delta q + L_{,t} \delta t \right) dt + L_{,\dot{q}} \delta q \Big|_{t_1}^{t_2}\end{aligned}\quad (2.49)$$

wobei beispielsweise $L_{,q} \delta q$ für $\sum L_{,q^k} \delta q^k$ steht. Nun wollen wir annehmen, dass $q(t)$ eine klassisch erlaubte Bahn sei, d.h. eine Lösung der Euler-Lagrange-Gleichungen.



Da eine Lösung durch Anfangsort und Anfangszeit sowie Endort und Endzeit bestimmt ist, hängt $S[q(t)]$ nur von den Orten und Zeiten zu Beginn und am Ende der klassischen Bahn ab, $S = S(t_2, q_2; t_1, q_1)$. Diese Funktion heißt *Hamiltonsche Prinzipalfunktion*. Für Lösungen verschwindet der Term zwischen den geschweiften Klammern in (2.49). Der verbleibende Integrand $L_{,t}$ ist eine totale Zeitableitung, da sich auf der rechten Seite von

$$\frac{d}{dt} (L_{,\dot{q}^k} \dot{q}^k - L) = \left(\frac{d}{dt} L_{,\dot{q}^k} \right) \dot{q}^k + L_{,\dot{q}^k} \ddot{q}^k - L_{,q^k} \dot{q}^k - L_{,\dot{q}^k} \ddot{q}^k - L_{,t}$$

wegen der Euler-Lagrange-Gleichungen alle Terme bis auf den letzten wegheben,

$$\frac{d}{dt} (L_{,\dot{q}^k} \dot{q}^k - L) = -L_{,t}$$

gilt. Die Variation der Prinzipalfunktion ist nun einfach

$$\delta S = \left(L_{,\dot{q}^k} \delta \dot{q}^k + \left(L - \sum L_{,\dot{q}^k} \dot{q}^k \right) \delta t \right) \Big|_{t_1}^{t_2}.$$

Halten wir die Anfangswerte fest und variieren nur die Enddaten, dann ergibt sich wegen $L_{,\dot{q}^k} \equiv p_k$

$$S_{,q^k} = p_k \quad \text{und} \quad S_{,t} = - \left(\sum p_k \dot{q}^k - L \right), \quad (2.50)$$

wobei das Teilchen zur Zeit t am Zielort q ankommt. Da der kanonische Impuls senkrecht auf den Niveaulächen von S steht, können die klassischen Bahnen aus S reproduziert werden.

Zwischen den Klammern in (2.50) steht die Legendre-Transformierte der Lagrange-funktion, also die Hamilton-Funktion. Damit ergibt sich die Hamilton-Jacobische Differentialgleichung für die Prinzipalfunktion:

$$S_{,t} + H(t, q^k, p_k) = S_{,t} + H(t, q^k, S_{,q^k}) = 0. \quad (2.51)$$

Zum Beispiel, für den harmonischen Oszillator mit Hamilton-Funktion²

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \mathbf{x}^2 \quad (2.52)$$

ist die klassische Lösung, welche zur Zeit $s = 0$ bei \mathbf{y} startet und zur Zeit $s = t$ bei \mathbf{x} ankommt, gleich

$$\mathbf{x}(s) = \mathbf{y} \cos \omega s + \frac{\mathbf{x} - \mathbf{y} \cos \omega t}{\sin \omega t} \sin \omega s. \quad (2.53)$$

Für die Prinzipalfunktion findet man

$$S = \frac{m}{2} \int_0^t (\dot{\mathbf{x}}^2(s) - \omega^2 \mathbf{x}^2(s)) ds = \frac{m\omega}{2} \left((\mathbf{x}^2 + \mathbf{y}^2) \cot(\omega t) - \frac{2\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{\sin \omega t} \right). \quad (2.54)$$

Man prüft leicht nach, dass diese Funktion die Hamilton-Jacobi-Gleichung

$$S_{,t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + \frac{m\omega^2}{2} \mathbf{x}^2 = 0 \quad (2.55)$$

erfüllt. Aus $\mathbf{p} = \nabla S = m\omega[\mathbf{x} \cot \omega t - \mathbf{y}/\sin \omega t]$ kann man nun die Bahnen $(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t))$ des harmonischen Oszillators im Phasenraum rekonstruieren.

Im stationären Fall hängt die Hamilton-Funktion nicht explizit von der Zeit ab, $H = H(q, p)$, und wir können die Zeitabhängigkeit der Prinzipalfunktion abspalten, $S = -Et + W(q)$. Die Funktion W erfüllt dann die *zeitunabhängige Hamilton-Jacobi-Gleichung*

$$E = H \left(q, \frac{\partial W}{\partial q} \right) \quad (2.56)$$

mit fester Energie E .

Nun wollen wir den Abschluss zur Wellenmechanik a la SCHRÖDINGER herstellen. Eine allgemeine *lineare* Wellengleichung für die Materiewellen, welche erster Ordnung in der

²Sind die q^k kartesisch, dann setzen wir meistens $q^k = x^k$.

Zeitableitung ist, hat die Form

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \left(t, q, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi \quad (2.57)$$

mit einer noch unbestimmten Funktion H . Nun schreiben wir die Wellenfunktion gemäß

$$\psi = e^{iS(t,q)/\hbar} \quad (2.58)$$

mit einer langsam mit den q veränderlichen Phasenfunktion S . Vernachlässigen wir zweite und höhere Ableitungen von S nach q , so impliziert die Wellengleichung folgende Gleichung für die Phase S von ψ :

$$\partial_t S + H \left(t, q, \frac{\partial S}{\partial q} \right) = 0. \quad (2.59)$$

Dies ist aber gerade die Hamilton-Jacobi-Gleichung zur Hamilton-Funktion H .

Zur Illustration kehren wir zum harmonischen Oszillator mit Hamilton-Funktion (2.52) zurück. Setzen wir die Parametrisierung (2.58) in die Wellengleichung (2.57) ein, so finden wir

$$0 = S_{,t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + \frac{m\omega^2}{2} \mathbf{x}^2 - \frac{i\hbar}{2m} \Delta S.$$

Hier sehen wir explizit, dass die Phasenfunktion S die Hamilton-Jacobi-Gleichung erfüllt, wenn wir höhere Ableitungen von S vernachlässigen, oder äquivalent dazu, nur Terme der Ordnung \hbar^0 beibehalten. Für $\hbar \rightarrow 0$ sollte aber die Quantenmechanik in die klassische Mechanik übergehen. Wir können also die Wellengleichung (2.57), welche für $\hbar \rightarrow 0$ in die klassische Hamilton-Jacobi-Gleichung für die Phase S von ψ übergeht, als korrekte Wellengleichung für ein allgemeines System, das klassisch durch die Hamilton-Funktion $H(t, q, p)$ beschrieben wird, ansehen. Damit haben wir die Verallgemeinerung der Schrödinger-Gleichung für ein Punktteilchen (2.46) auf *beliebige* Hamiltonsche Systeme gefunden.

Gleichzeitig ergeben sich die allgemeinen *Korrespondenzregeln*, wie ein klassisches System zu quantisieren ist. Man ersetze in der klassischen Hamilton-Funktion die kanonischen Impulse durch die partiellen Ableitungen nach den verallgemeinerten Koordinaten $p_i \rightarrow \frac{\hbar}{i} \partial_i$. Die zum System gehörige *zeitabhängige* Schrödinger-Gleichung lautet dann

$$i\hbar \partial_t \psi(t, q) = H(t, q^i, p_i) \psi(t, q), \quad p_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q^i}. \quad (2.60)$$

Im stationären Fall, $H = H(q, p)$, können wir wie bei der Hamilton-Jacobi-Gleichung die Zeitabhängigkeit abspalten,

$$\psi(t, q) = e^{-iEt/\hbar}\psi(q). \quad (2.61)$$

Nach Einsetzen in (2.60) ergibt sich die *stationäre* Schrödinger-Gleichung für die zeitunabhängige Wellenfunktion $\psi(q)$ in (2.61),

$$E\psi(q) = H(q^i, p_i)\psi(q), \quad p_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q^i}. \quad (2.62)$$

Diese *Eigenwertgleichung* ist die Verallgemeinerung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom (2.47) auf *beliebige* stationäre Hamiltonsche Systeme. Der Differentialoperator $H(q^i, p_i)$ heißt Hamilton-Operator und seine Eigenwerte E sind die möglichen Werte der Energie.

2.3.2 Wellengleichung bei elektromagnetischen Kräften

Wir wenden nun die soeben gewonnenen Erkenntnisse an, um die Quantenmechanik eines elektrisch geladenen Teilchens in elektrischen und magnetischen Feldern abzuleiten. In der klassischen Physik wird die Bewegung eines Teilchens mit Masse m und Ladung e durch eine Trajektorie eines (idealisierten) Punktteilchens beschrieben. Auf ein Teilchen, das sich zur Zeit t am Ort \mathbf{x} befindet und mit der Geschwindigkeit $\dot{\mathbf{x}}$ bewegt, wirkt die Lorentz-Kraft

$$\mathbf{F} = e \left(\mathbf{E}(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{c} \dot{\mathbf{x}} \wedge \mathbf{B}(t, \mathbf{x}) \right). \quad (2.63)$$

Zur Lagrangeschen oder Hamiltonschen Formulierung der Bewegungsgleichung des Massenpunktes ist es notwendig, anstelle des elektromagnetischen Feldes die elektromagnetischen Potentiale $\varphi(t, \mathbf{x})$ und $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$ einzuführen,

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} \quad , \quad \mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}. \quad (2.64)$$

Elektrodynamische Potentiale, die sich lediglich durch eine Eichtransformation mit einer Eichfunktion $\lambda(t, \mathbf{x})$ unterscheiden,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}'(t, \mathbf{x}) &= \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) - \nabla\lambda(t, \mathbf{x}) \\ \varphi'(t, \mathbf{x}) &= \varphi(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \lambda(t, \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.65)$$

liefern dasselbe elektromagnetische Feld. In der klassischen Mechanik wird nun gezeigt, dass die (nichtrelativistische) Lorentzgleichung äquivalent zu den kanonischen Gleichungen zur Hamilton-Funktion

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \right)^2 + e\varphi(t, \mathbf{x}), \quad (2.66)$$

ist. Nach der Korrespondenzregel lautet die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung für ein geladenes Teilchen mit Masse m und Ladung e , zum Beispiel ein Elektron, im elektromagnetischen Feld wie folgt,

$$i\hbar\partial_t\psi(t, \mathbf{x}) = H\psi(t, \mathbf{x}), \quad H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \right)^2 + e\varphi(t, \mathbf{x}). \quad (2.67)$$

Auf die Vieldeutigkeiten bei der Ordnung der Operatoren kommen wir später zu sprechen. Für zeitunabhängige Potentiale ist H zeitunabhängig und nach Faktorisierung der Zeitabhängigkeit ergibt sich die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$E\psi(\mathbf{x}) = H\psi(\mathbf{x}). \quad (2.68)$$

Die Schrödinger-Gleichung eines geladenen Punktteilchens erhält man also aus derjenigen des ungeladenen Teilchens durch die Ersetzungen

$$\begin{aligned} \partial_t &\longrightarrow \partial_t + \frac{ie}{\hbar}\varphi(t, \mathbf{x}) \\ \nabla &\longrightarrow \nabla - \frac{ie}{\hbar c}\mathbf{A}(t, \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.69)$$

Die hierdurch gewonnene Wirkung eines elektromagnetischen Feldes auf das geladene Punktteilchen wird als *minimale Kopplung* bezeichnet.

Die minimale Kopplung des elektromagnetischen Feldes lässt sich direkt auf den Fall mehrerer Teilchen verallgemeinern. Für n unterscheidbare und spinlose Punktteilchen mit Massen m_i und Ladungen e_i in einem äußeren elektrischen und magnetischen Feld hat der Hamilton-Operator die Form

$$H = \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{1}{2m_i} \left(\mathbf{p}_i - \frac{e_i}{c} \mathbf{A}(t, \mathbf{x}_i) \right)^2 + e_i\varphi(t, \mathbf{x}_i) \right\} + V(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n), \quad (2.70)$$

wobei die gesamte innere Wechselwirkung der Teilchen untereinander durch die hier nicht näher spezifizierte Potentialfunktion V beschrieben wird. Für nicht unterscheidbare Teilchen müssen die Wellenfunktionen $\psi(t, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n)$ weiter eingeschränkt werden.

Das Lösen der zentralen partiellen Differentialgleichungen $i\hbar\psi = H\psi$ oder $E\psi = H\psi$ für spezielle elektromagnetische Felder ist ein Hauptanliegen der Quantenmechanik und aller Gebiete, welchen die Quantenmechanik zugrunde liegt. Eine geschlossene Lösung kann nur für einfache Systeme angegeben werden. Für realistische Vielkörpersysteme ist man auf Näherungen oder numerische Verfahren zur Lösung dieser komplizierten Gleichungen angewiesen.

2.3.3 Allgemeine Potentialprobleme

Wir betrachten ein System mit N Freiheitsgraden und beschreiben die Systemlage mit verallgemeinerten lokalen Koordinaten $q = \{q^1, \dots, q^N\}$ des Konfigurationsraums \mathcal{C} . Zum Beispiel ist der Konfigurationsraum eines Punktteilchens \mathbb{R}^3 und man kann kartesische Koordinaten oder Kugelkoordinaten zur Festlegung des Teilchenorts wählen. Im Konfigurationsraum des Kreisels \mathbb{R}^3 wählt man oft die drei Eulerwinkel.

Der Abstand zweier infinitesimal benachbarter Punkte mit Koordinaten q und $q + dq$ wird durch den *metrischen Tensor* $g_{ij}(q)$ charakterisiert,

$$ds^2 = \sum_{ij} g_{ij}(q) dq^i dq^j, \quad (2.71)$$

und für eine Trajektorie $q(t)$ in \mathcal{C} ist das Geschwindigkeitsquadrat gleich

$$v^2 = \left(\frac{ds}{dt}\right)^2 = \sum g_{ij} \dot{q}^i \dot{q}^j. \quad (2.72)$$

Damit lautet die klassische Lagrange-Funktion eines Systems mit Potentialkräften

$$L = \frac{1}{2} \sum_{ij} g_{ij}(q) \dot{q}^i \dot{q}^j - V(q). \quad (2.73)$$

Zum Beispiel hat der gestützte symmetrische Kiesel mit Masse M und Hauptträgheitsmomenten (A, A, C) im Schwerfeld die Lagrange-Funktion

$$L = \frac{A}{2} (\dot{\vartheta}^2 + \sin^2 \vartheta \dot{\varphi}^2) + \frac{C}{2} (\dot{\psi} + \cos \vartheta \dot{\varphi})^2 - Mgl \cos \vartheta,$$

wobei ℓ den Abstand zwischen Stütz- und Schwerpunkt bezeichnet.

Der zur verallgemeinerten Koordinate q^i kanonisch konjugierte Impuls ist $p_i = \sum_j g_{ij} \dot{q}^j$,

und damit ist die zu L in (2.73) gehörige klassische Hamilton-Funktion

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij} g^{ij}(q) p_i p_j + V(q) \quad \text{mit} \quad \sum_k g_{ik} g^{kj} = \delta_i^j. \quad (2.74)$$

Dabei ist g^{ij} die zu g_{ij} inverse Matrixfunktion. Wenn wir dem Korrespondenzprinzip folgend die klassischen Impulse durch Ableitungsoperatoren ersetzen, dann ergibt sich sofort das *Ordnungsproblem*: Klassisch sind zum Beispiel

$$g^{ij} p_i p_j \quad \text{und} \quad \frac{1}{\sqrt{g}} p_i (\sqrt{g} g^{ij} p_j), \quad g = \det(g_{ij}), \quad (2.75)$$

gleich, quantenmechanisch aber nicht, da die Ableitungsoperatoren p_i und die Funktionen $\sqrt{g} g^{ij}$ für eine q -abhängige Metrik nicht vertauschen. Wir werden im nächsten Abschnitt argumentieren, dass die zweite Wahl mit den Prinzipien der Quantenmechanik verträglich ist. Die korrekte Schrödingergleichung für ein allgemeines System mit Lagrange-Funktion (2.73) hat also die Form

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\psi}(t, q) &= H\psi(t, q) \quad \text{bzw.} \quad E\psi(q) = H\psi(q) \\ \text{mit } H &= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{g}} p_i \sqrt{g} g^{ij} p_j + V(q), \quad p_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q^i}. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Dies ist die allgemeine Schrödinger-Gleichung für Hamiltonsche Systeme mit Potentialkräften. Sie beschreibt zum Beispiel die Dynamik von n über die Coulombkraft wechselwirkenden Teilchen, von starren Körpern und Kreiseln oder von Systemen im statischen Gravitationsfeld. Das Gravitationsfeld wird dabei durch den metrischen Tensor g_{ij} und das Newtonsche Potential V beschrieben. Diese sogenannte *minimale Kopplung* ans Gravitationsfeld, bei der die gewöhnlichen durch die allgemein kovarianten Ableitungen ersetzt werden, wurde experimentell bestätigt. Dazu wurden zwei von *einer* Quelle emittierte Neutronenstrahlen, nachdem sie verschiedene Wege im Gravitationsfeld der Erde zurücklegten, zur Interferenz gebracht. Im ursprünglichen Experiment von OVERHAUSER und COLELLA wurde ein Neutroneninterferometer benutzt, für den die zwei Neutronenstrahlen eine Fläche von etwa 6 cm^2 einschlossen [43]. Das Interferometer wurde 180° um die Achse senkrecht zur Erdoberfläche (und dem einfallenden Neutronenstrahl) gedreht und die Verschiebung des Interferenzmusters gemessen. Die Beobachtung stimmt mit den Vorhersagen der Schrödingergleichung (2.76) im Rahmen der Messgenauigkeit überein. Die Genauigkeit der Experimente ist heute besser als ein Prozent.

Wir wollen uns nun überlegen, was die Wahrscheinlichkeitsdichte für das Auffinden des Systems im Konfigurationsraum ist. Wir haben bereits früher argumentiert, dass für ein Teilchen im \mathbb{R}^3 die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen im Volumenelement d^3x

um \mathbf{x} zu finden, für eine auf eins normierte Materiewelle gleich $|\psi(t, \mathbf{x})|^2 d^3x$ ist. Benutzen wir krummlinige Koordinaten $\mathbf{x} = \mathbf{x}(q) = \mathbf{x}(q^1, q^2, q^3)$, so ergibt sich für dieselbe Wahrscheinlichkeit

$$w(t, \mathbf{x})d^3x = |\psi(t, \mathbf{x})|^2 d^3x = |\psi(t, \mathbf{x}(q))|^2 (\det J) d^3q \quad \text{mit} \quad J_j^i = \frac{\partial x^i}{\partial q^j}.$$

Da in diesem Fall die Jacobi-Matrix J auch die Koeffizienten der Metrik bestimmt,

$$ds^2 = \sum dx^i dx^i = \sum (J^t J)_{ij} dq^i dq^j = \sum g_{ij} dq^i dq^j \quad (2.77)$$

ist die Determinante von $J^t J$ gleich der Determinante g des metrischen Tensors g_{ij} und man erhält für die Wahrscheinlichkeit den Ausdruck

$$w(t, \mathbf{x})d^3x = |\psi(t, q)|^2 \sqrt{g} d^3q, \quad \psi(t, q) \equiv \psi(t, \mathbf{x}(q)), \quad g = \det(g_{ij}). \quad (2.78)$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen zur Zeit t im Teilgebiet $\Delta \subset \mathcal{C}$ des Konfigurationsraums zu finden, ist dann

$$w_\Delta(t) = \int_\Delta |\psi(t, q)|^2 \sqrt{g} d^3q. \quad (2.79)$$

Der Wurzelfaktor sorgt dafür, dass das Integral unabhängig von den gewählten Koordinaten ist. Diese natürliche Forderung stellen wir auch für allgemeinere Systeme, zum Beispiel Systeme, deren Konfigurationsraum keine kartesischen Koordinaten zulassen. Wir wollen aber annehmen, dass \mathcal{C} mindestens eine Mannigfaltigkeit mit Riemannscher Metrik ist. Für derartige Systeme ist dann die Wahrscheinlichkeit dafür, im Zustand mit Wellenfunktion $\psi(q)$ das System im Gebiet Δ des Konfigurationsraum zu finden,

$$w_\Delta(t) = \int_\Delta \bar{\psi}(t, q) \psi(t, q) \sqrt{g} d^N q. \quad (2.80)$$

Die Wahrscheinlichkeit, das System irgendwo in \mathcal{C} zu finden, soll wieder das Quadrat der Norm der Wellenfunktion sein,

$$\|\psi\|^2 = (\psi, \psi) = \int_{\mathcal{C}} \bar{\psi}(q) \psi(q) \sqrt{g} d^N q. \quad (2.81)$$

Diese Norm ist positiv und verschwindet nur für $\psi = 0$. Sie definiert das folgende *Skalarprodukt* auf dem Raum der Wellenfunktionen

$$(\phi, \psi) = \int \bar{\phi}(q) \psi(q) \sqrt{g} d^N q. \quad (2.82)$$

Diese Bilinearform hat alle Eigenschaften eines Skalarprodukts und seine Eigenschaften werden uns im nächsten Kapitel beschäftigen.

2.4 Erhaltung der Wahrscheinlichkeit

Für eine auf Eins normierte Wellenfunktion, $\|\psi\| = 1$, ist $w_\Delta(t)$ in (2.80) die Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen im Gebiet Δ des Konfigurationsraums \mathcal{C} zu finden. Damit diese Aussage zu allen Zeiten sinnvoll ist, darf die Norm einer Lösung der zeitunabhängigen Schrödinger-Gleichung nicht von der Zeit abhängen. Die Wahrscheinlichkeit, das System irgendwo im Konfigurationsraum zu finden muss nämlich zu allen Zeiten Eins sein. Also muss die Zeitableitung dieser Wahrscheinlichkeit verschwinden,

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{C}} \bar{\psi}(t, q) \psi(t, q) \sqrt{g} d^N q = \frac{d}{dt} (\psi, \psi) = 0. \quad (2.83)$$

Diese Bedingung an die Lösungen von $i\hbar\partial_t\psi = H\psi$ schränkt die Form der Hamilton-Operatoren und die Menge der erlaubten Wellenfunktionen $\psi : \mathcal{C} \rightarrow \mathbb{C}$ ein, da sie für jede Lösung äquivalent zur Bedingung

$$i\hbar \frac{d}{dt} (\psi, \psi) = (\psi, H\psi) - (H\psi, \psi) = 0 \quad (2.84)$$

ist. Wie im letzten Abschnitt wird ein zeitunabhängiger metrischer Tensor vorausgesetzt. In vielen Fällen legt (2.84) die richtige Ordnung der Operatoren beim Übergang von der klassischen Hamilton-Funktion zum quantenmechanischen Hamilton-Operator fest. Die Wahrscheinlichkeit $w_\Delta(t)$ für das Auffinden des System in Δ wird für $\Delta \neq \mathcal{C}$ im Allgemeinen von der Zeit abhängen. Aber ähnlich wie bei der Bilanzgleichung für die elektrische Ladung werden wir für die Wahrscheinlichkeiten w_Δ eine Bilanzgleichung erwarten, die angibt, in welche Richtung die Aufenthaltswahrscheinlichkeit fließt. Entsprechend wird diese Bilanzgleichung einen Wahrscheinlichkeitsstrom enthalten.

Wir betrachten den sehr allgemeinen Modell-Hamilton-Operator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} D^2 + V(q), \quad D^2 = \frac{1}{\sqrt{g}} D_i \sqrt{g} g^{ij} D_j, \quad D_i = \partial_i - iA_i(q), \quad (2.85)$$

wie er in den letzten beiden Abschnitten vorkam. Der obige Hamilton-Operator beschreibt allgemeine Systeme im äußeren elektromagnetischen Feld in beliebigen Koordinaten oder bei Kopplung ans statische Gravitationsfeld. Die Lichtgeschwindigkeit, Ladungen und Massen wurden in den äußeren Feldern A_i , g_{ij} und V absorbiert. Das Potential V kann zum Beispiel auch die gegenseitige Coulomb-Wechselwirkung von geladenen Teilchen mo-

dellieren. Es wird vorausgesetzt, dass die Hamilton-Funktion über dem Phasenraum mit Koordinaten (q, p) definiert ist. Für die Beschreibung von Teilchen mit Spin ist deshalb das Modell (2.85) ungenügend.

Wir haben die Operatorordnung in (2.85) schon so gewählt, dass für genügend schnell abfallende Wellenfunktionen in einem unbeschränkten Konfigurationsraum die Wahrscheinlichkeit, das System irgendwo zu finden, zeitunabhängig ist. Um dies einzusehen, integrieren wir im Integral

$$\int_{\Delta} \sqrt{g} \overline{D_i \phi} g^{ij} D_j \psi$$

einmal partiell bezüglich der Koordinate q^i und einmal bezüglich der Koordinate q^j . Wenn wir noch die Symmetrie des metrischen Tensors berücksichtigen ergibt sich die Gleichung

$$\int_{\Delta} \partial_i (\sqrt{g} \overline{\phi} g^{ij} D_j \psi) - \int_{\Delta} \sqrt{g} \overline{\phi} D^2 \psi = \int_{\Delta} \partial_i (\sqrt{g} \overline{D_j \phi} g^{ij} \psi) - \int_{\Delta} \sqrt{g} \overline{D^2 \phi} \psi,$$

oder, wenn wir die Divergenz-Terme zusammenfassen,

$$\int_{\Delta} \sqrt{g} (\overline{\phi} D^2 \psi - \overline{D^2 \phi} \psi) = \int_{\Delta} \partial_i (\sqrt{g} g^{ij} (\overline{\phi} D_j \psi - \overline{D_j \phi} \psi)). \quad (2.86)$$

Setzen wir in dieser Gleichung $\phi = \psi$, dann ergibt sich für die zeitliche Änderung der Wahrscheinlichkeit, das System im Gebiet $\Delta \subset \mathcal{C}$ zu finden, die Formel

$$\frac{dw_{\Delta}}{dt} \stackrel{(2.80)}{=} \frac{1}{i\hbar} \int_{\Delta} (\overline{\psi} H \psi - \overline{H \psi} \psi) \sqrt{g} d^N q \stackrel{(2.86)}{=} - \int_{\Delta} \partial_i j^i d^N q = - \int_{\partial \Delta} j^i d\Sigma_i \quad (2.87)$$

$$\text{mit } j^i = \frac{\hbar}{2i} \sqrt{g} g^{ij} (\overline{\psi} D_j \psi - \psi \overline{D_j \psi}). \quad (2.88)$$

Dabei ist $d\Sigma_i$ das gerichtete Oberflächenelement auf dem Rand $\partial \Delta$ von Δ . Im letzten Schritt in (2.87) wurde der Gaußsche Satz zur Anwendung gebracht.

Dies ist die gesuchte *Bilanzgleichung* für die Wahrscheinlichkeit: die Änderung der Wahrscheinlichkeit für das Auffinden des Systems in Δ ist gleich dem Fluss des Stroms j^i durch die Oberfläche von Δ . Demnach ist der reelle Strom j^i als *Wahrscheinlichkeitstromdichte* zu interpretieren. In seiner differentiellen Form wird (2.87) zu einer *Kontinuitätsgleichung*,

$$\frac{d}{dt} (\sqrt{g} \overline{\psi} \psi) + \partial_i j^i = 0, \quad (2.89)$$

ähnlich der Kontinuitätsgleichung für die elektrische Ladung in der Elektrodynamik. Es ist der nach Schrödinger benannte Erhaltungssatz.

Die Bilanzgleichung (2.87) kann auch auf den gesamten Konfigurationsraum angewandt werden. Dann folgt für genügend schnell abfallende, beziehungsweise auf dem Rand von \mathcal{C} verschwindende Wellenfunktionen, dass $w_{\mathcal{C}} = \|\psi\|^2$ zeitunabhängig ist. Für eine andere Ordnung der Operatoren in (2.85) wäre dies im Allgemeinen nicht mehr der Fall. Dies ist das oben erwähnte Argument für die Wahl der Operatorordnung in (2.85). Für geeignete Randbedingungen gilt also

$$(\psi, H\psi) = (H\psi, \psi) \quad \text{bzw.} \quad (\phi, H\psi) = (H\phi, \psi). \quad (2.90)$$

Operatoren, die unter dem Skalarprodukt „übergewälzt“ werden können, heißen hermitesch. Ob ein Operator hermitesch ist hängt neben seiner expliziten Form, zum Beispiel der Operatorordnung, auch von den gewählten Randbedingungen an die Wellenfunktionen ab.

Um die Kontinuitätsgleichung (2.89) zu finden, haben wir in (2.86) $\phi = \psi$ gesetzt. Ohne diese Annahme folgt aus (2.86) eine Verallgemeinerung der aus der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen bekannten Wronski-Identität,

$$i\hbar (\sqrt{g}\bar{\phi}\psi)' + \frac{1}{2}\hbar^2 \partial_i (\sqrt{g}g^{ij} (\bar{\phi}D_j\psi - \overline{D_j\phi}\psi)) = 0. \quad (2.91)$$

Für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren dürfen wir die Zeitabhängigkeit faktorisieren,

$$\begin{aligned} \phi(t, q) &= e^{-iE_\phi t/\hbar} \phi_0(q) \quad , \quad H\phi_0 = E_\phi \phi_0 \\ \psi(t, q) &= e^{-iE_\psi t/\hbar} \psi_0(q) \quad , \quad H\psi_0 = E_\psi \psi_0, \end{aligned}$$

und (2.91) vereinfacht sich dann zu

$$\frac{\hbar^2}{2} \partial_i \{ \sqrt{g}g^{ij} (\bar{\phi}_0 D_j \psi_0 - \overline{D_j \phi_0} \psi_0) \} = (E_\phi - E_\psi) \sqrt{g} \bar{\phi}_0 \psi_0. \quad (2.92)$$

Dies ist die verallgemeinerte Wronskische Identität. Ist insbesondere $\phi_0 = \psi_0$, dann verschwindet die rechte Seite und links steht die Divergenz des Wahrscheinlichkeitsstroms von ψ . Also ist für jede Eigenfunktionen von H der Strom quellenfrei und die Wahrscheinlichkeit dafür, das System in einem beliebigen Gebiet zu finden, ist zeitunabhängig.

Für ein Punktteilchen, *kartesische* Koordinaten und ein verschwindendes Vektorpotential hat der Wahrscheinlichkeitsstrom die einfache Form

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im} (\bar{\psi} \nabla \psi - \overline{\nabla \psi} \psi).$$

Ist ψ reell, dann verschwindet der Strom und die Wahrscheinlichkeitsdichte ist zeitunabhängig. Für eine ebene Welle

$$\psi = \alpha e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}/\hbar} \quad \text{ist} \quad \mathbf{j} = |\alpha|^2 \frac{\mathbf{p}}{m} \quad (2.93)$$

ortsunabhängig. Die Wahrscheinlichkeit fließt in Richtung des Teilchenimpulses und ist proportional zur Intensität der Welle.